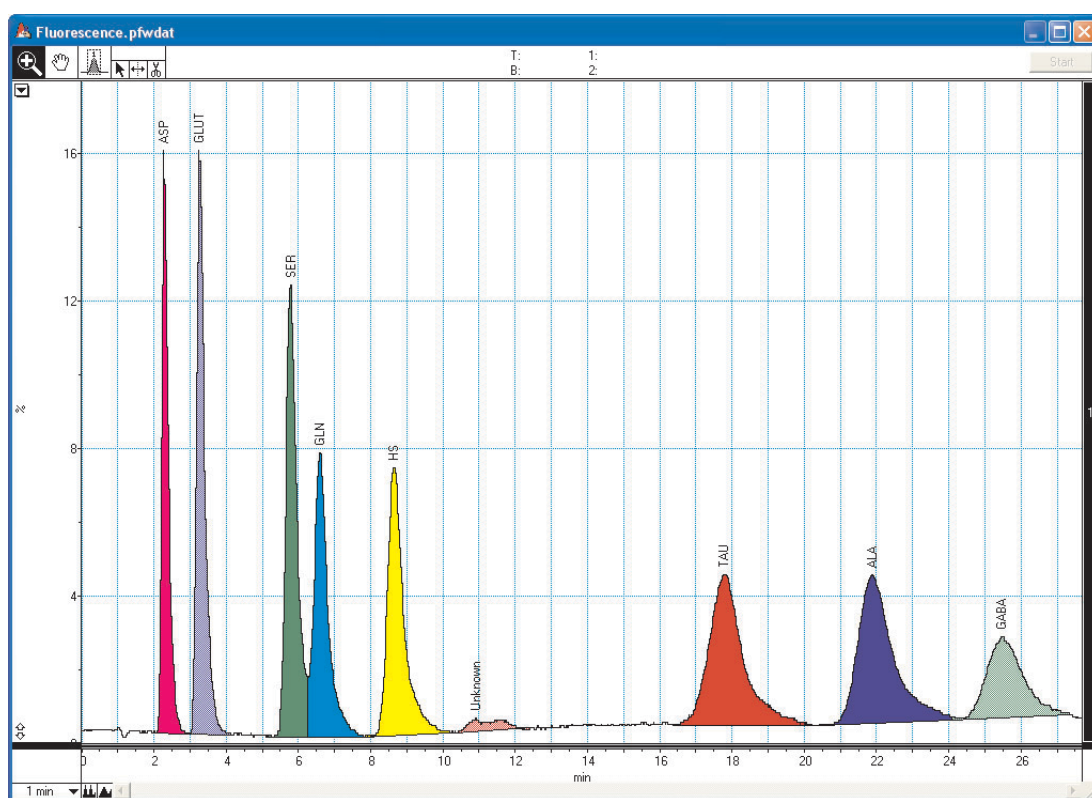


PowerChrom

version 2.5

for Windows and Macintosh Computers

日本語解説書



PowerChrom[®]

www.eDAQ.jp

(有)ADInstruments ジャパン

本マニュアルは現時点での可能な限り正確な情報を記載しています。但し、記載されているソフトウェア、およびハードウェアに関する事柄は将来変更される可能性があります eDAQ Pty Ltd は必要に応じ仕様等の変更を行う権利を有します。最新の変更内容は常に別途配布されます。

商標

e-corder and PowerChrom は eDAQ Pty Ltd の登録商標です。EChem、及び e-corder 201 などのデータ記録装置の特定のモデル名は eDAQ Pty Ltd の商標です。

Chart、Scope、は ADInstruments Pty Ltd の商標です。

その他の商標

Apple, the Apple logo, AppleScript, AppleTalk, Geneva, HyperCard, ImageWriter, LaserWriter, Mac, Macintosh, Power Macintosh, PowerBook, QuickDraw, StyleWriter, and TrueType は Apple Computer, Inc. の商標です。Finder は Apple Computer, Inc. の商標です。

PostScript は Adobe Systems, Incorporated の登録商標です。

All other trademarks are the properties of their respective owners.

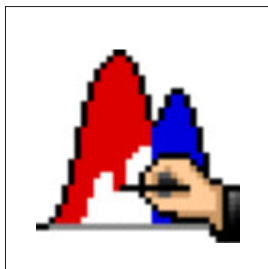
Document Number: U-ES280-1003
For PowerChrom version 2.3.1+

Copyright © October 2003

eDAQ Pty Ltd
6 Doig Avenue
Denistone East, NSW 2112
AUSTRALIA

すべての著作権利は eDAQ Pty Ltd が留保します。本マニュアルのすべてあるいは一部を、eDAQ Pty Ltd 及び eDAQ Japan の許可なく無断で複写、複製、翻訳、あるいは他の電子媒体などへ移植することを禁じます。





目次

1 章 はじめに 1

- Macintosh と Windows との違い 1
- スタートする前に 2
 - 本書の使い方 2
- 使用するコンピュータ 2
 - Windows コンピュータ 2
 - Macintosh コンピュータ 3
- クロマトグラム分析装置 3
- プログラムのインストール 3
 - Windows 4
 - Macintosh 4
- プログラムに名前を登録する 4
 - プログラムを終了する 6

2 章 基本的な操作方法 7

- プログラムの概要 8
 - ドキュメントとウィンドウ 8
 - 主な機能について 9
 - プログラムを始動する 11
 - Easy Access 11
 - ファイルを開く 13
- プログラムを終了する 14
- マニュアルサンプリング 15
 - クロマトグラムウィンドウ 17
 - ランミニウィンドウ 20
- 記録 22
 - 記録時間 22
 - 記録時間の制限 23
 - システムへの妨害 24

3 章 データディスプレイ 25

- クロマトグラムのディスプレイ設定 26
 - データディスプレイエリア 26
 - 振幅軸 27
 - 時間軸 28
 - 軸ラベル 29
 - データ表示の線とカラー 30
 - ピークディスプレイ 30
 - ランボタンの使い方 33
 - チャンネルの重ね合わせ 33
 - ランの重ね合わせ 33
- テーブルの表記設定 36
 - 通常のウィンドウコントロール 36
 - テーブルコントロール 37
- 単位について 44
 - 単位変換 45

4 章 セットアップ 49

- データを記録するための設定 50
 - インジェクトセッティング 50
 - ハードウェアの設定 52
 - インプットアンプリファイア 54
- キャリブレーションドキュメント 58
 - キャリブレーションメニュー 59
 - キャリブレーションテーブルビュー 62
 - 検量線を見る 67
 - キャリブレーションドキュメントを使う 70

メソッドドキュメント	71
メソッドメニュー	72
メソッドテーブル	73
メソッドのディスプレイセッティン	77
メソッドドキュメントを使って	79
シーケンスドキュメント	80
シーケンスメニュー	80
メソッドやキャリブレーションの管理	81
サンプルテーブル	85
シーケンスのディスプレイセッティン	88
シーケンスドキュメントを使う	89

5 章 ファイルの取り扱い 91

ドキュメントの確認	92
記録の測定	93
ランを追加する	96
データの編集	97
データを転送する	98
クリップボード	101
セーブオプション	101
シーケンスを取り出す	102
キャリブレーションやメソッドを取り出す	102
セッティングファイル	102
ファイルを追加する	103
印刷	104
印刷ページの設定	104
ウィンドウの印刷	106
ドキュメントを印刷する	106
プリントレイアウト	107

6 章 データの解析 111

クロマトグラムを解析する	112
手動でピークを修正する	115
ピークメニュー	117
外部ランデータ	121
インジェクションタイムの設定	122
ピークレポート	123
ランのインフォメーション	128
サンプルテーブル	129
メソッドとキャリブレーションの管理	131

解析を更新する 132

7 章 カスタマイズと自動化 137

プレファレンス	138
<Options>	138
データバファリング	139
メニュー	140
キーボードショートカット	140
セッティングをセーブする	141
始動セッティング	141
緊急なアクセス	142
ハードウェアのセットアップ	143
ファイルを変換する	143
解析モード	146

A メニューとショートカットキー 147

メニュー	147
ショートカットキー	152

B トラブルシューティング 155

技術サポート	155
一般的なトラブルの解決策	158

C 技術資料 163

Glossary	171
インデックス	173

ライセンスと保証承諾書 183

1

C H A P T E R O N E

はじめに

パワークロムのプログラムはクロマトグラムのデータをマニュアル、又は自動的に記録し解析するソフトウェアです。このプログラムは PowerChrom ハードウェアを使い Windows 95 / 98/2000 / Me/XP、又は Macintosh OS.9 または X の環境で使用できます。この章ではプログラムのインストール方法、必要なハードウェアについて説明します。

Macintosh と Windows との違い

このソフトウェアは Macintosh と Windows コンピュータとで同じように動作しますが、コマンドやショートカットキーなど一部の違いがあります。Macintosh の <Command (⌘)-> キーは、Windows PC では <Ctrl-> キーに相当します。また Macintosh の <Option-> キーは Windows PC では <Alt-> キーになります。使用するコンピュータの機種によっては、このマニュアルの図と実際のソフトウェアのコントロールウィンドウとの間に若干の相違が有るかも知れませんが、操作上は殆ど問題になりません。

スタートする前に

このプログラムをインストールするには、まず使用するコンピュータの環境について知っておく必要があります。新しいコンピュータを使う場合はマウスやキーボードの使用方法、コマンドの選択方法、コピーの仕方などはコンピュータについているユーザズガイドを参考にしてください。

このマニュアルで使用する専門用語は [用語解説](#)、171 ページに規定してあります。

本書の使い方

すぐにこのプログラムを使用する場合には、第 2 章“プログラムの概要”を読んでからにして下さい。主要機能や使用方法はプログラムのデモンストレーションファイルを利用することで習得できます。データの記録中に問題が生じたり予想外の結果になった場合、また、機能について知りたい場合には、この取扱説明書を参考にしてください。

使用するコンピュータ

パワークロムのソフトウェアは CD ROM で供給されます。使用するコンピュータには CD ドライブ、および記録接続用の USB ポートの搭載が必要です。

Windows コンピュータ

最小限必要な環境：Pentium あるいはそれに準ずる速度の CPU を搭載し、ハードディスク、CD ROM ドライブ搭載の標準機能を有するコンピュータ、Windows 98 以上、16 MB RAM、14 インチ以上のモニター。

推奨環境：Pentium II あるいはそれ以上に準ずる速度の CPU を搭載し、Windows 2000 または XP のコンピュータ、32 MB RAM、CD ROM ドライブ、16 インチ以上のモニター。

Macintosh コンピュータ

マッキントッシュ G3 以上のコンピュータ、ハードディスク、CD ROM ドライブ、システム 8.6 以降、RAM の空き容量 8MB、16 インチ以上のモニター。

クロマトグラム分析装置

クロマトグラムの記録には基本的なクロマトグラム測定システム（カラム、ポンプ、インジェクタ、検出器など）が必要です。パワークロムは通常使用されるチャートレコーダやインテグレータの代わりになるものです。1つのカラム系につき2台の検出器をサポートします。プログラムからポンプコントロールの設定ができますが、設定には限りがあります。大抵はポンプ本体にコントロール機能が付いているか、オートサンプラーを使用することになります。

このプログラムはパワークロムと E- コーダのハードウェアで使用します。ただし、パワークロムハードウェアの方が専用機種として設計されているためクロマトグラム測定に向いています。

また、記録したデータのハードコピーを印刷するのに、コンピュータと接続するプリンターが必要です。使用するコンピュータと互換性のあるプリンターなら殆ど問題なく使用できます。但し、高画質のハードコピーが必要なら 'PostScript' 対応のレーザプリンターをお奨めします。

パワークロムはフローインジェクション解析装置、ガスクロマトグラフィなどの記録用としても使われています。

プログラムのインストール

まずハードディスクに有るパワークロムの古いバージョンを削除して下さい。複数のプログラムバージョンが在ると、故意に古いバージョンのプログラムを使ってしまう恐れがあります。

PowerChrom インストラーを含む CD ROM が提供されています。インストールにはハードディスクに最低 8MB の空き容量が必要です。

インストールした後はオリジナルの CD ROM は安全な場所に保管して下さい。一度に 1 組のプログラムに対して 1 台のコンピュータしか使用が許可されていない点にご注意下さい。



ショートカットアイコン

Windows

コンピュータにインストーラ CD を挿入します。自動的にインストールを開始します。画面の指示に従ってください。

インストーラ CD を挿入しても何らかの理由で自動的にインストールされない場合は、CD を自分で開いて PowerChromSetup ファイルを立ち上げて下さい。

デフォルトインストールで行うと、PowerChrom.exe ファイルがハードディスクの Programs\eDAQ\PowerChrom サブディレクトリにインストールされ、そのファイルにはサンプルデータファイル、"Install.log" ファイル、及びこのマニュアルに含まれている重要な最新情報の "Read Me.txt" ファイルが入っています。また、PowerChrom ショートカットアイコンがデスクトップ上にインストールされます。

Macintosh



PowerChrom v2.3.1
Installer



プログラムアイコン

コンピュータに PowerChrom インストーラを含む CD ROM を挿入します。PowerChrom 2.5 Installer アイコンをダブルクリックしてインストールを開始し、操作手順に従います。インストールが終了するとダイアログボックスで知らせます。

ハードディスクには "PowerChrom v2.2" のフォルダーが作成されています。このフォルダーには PowerChrom プログラムホルダーとデモンストレーションフォルダーが入っています。

プログラムに名前を登録する

ハードウェアマニュアルに従って PowerChrom をコンピュータに接続して下さい何か問題が生じた場合は、Appendix B [155 ページ](#) に従ってください。

プログラムを開くには PowerChrom アイコンをダブルクリック、又は (Windows PC では) デスクトップの PowerChrom ショートカットアイコンをダブルクリックします。Windows PC でデフォルトインストールした場合は Windows のコマンドメニューからスタート > すべてのプログラム > eDAQ > PowerChrom でもプログラムにアクセスできます：

スタート>
すべてのプログラム>
eDAQ >
eDAQ PowerChrom

初めてプログラムを開くと図 1-1 のようなダイアログボックスが表示します。コンピュータが既に使用者の名前を登録している場合にはその名前が表示されますが、何も表示されていない場合には名前を入力して下さい。入力が済み次第 <OK> ボタンをクリックしてダイアログボックスを閉じて下さい。

図 1-1

E このダイアログボックスに名前と所属組織名を入力して下さい。ライセンスコードはインストラクター CD のケースの裏に明記してあります。

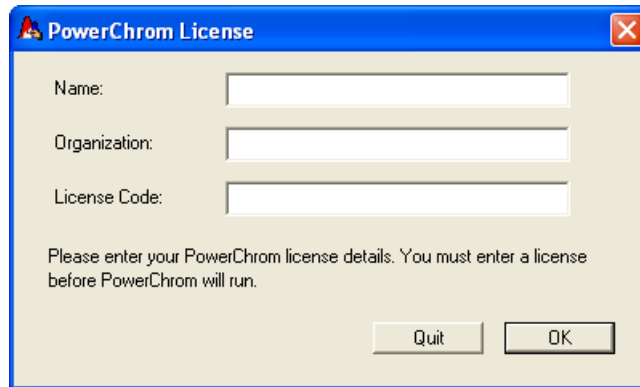
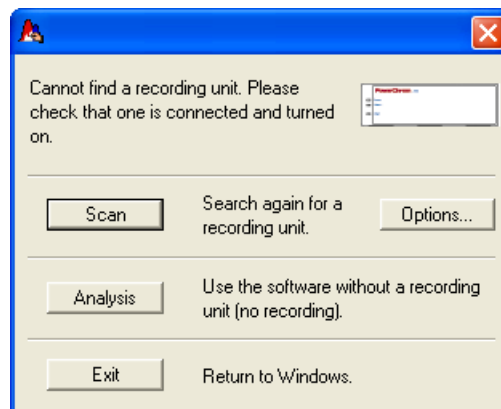


図 1-2

ハードウェアが正しく接続されていないとこのダイアログボックスが出ます。 .



ハードウェアとコンピュータが正しく接続されていない場合には、図 1-2 のようなダイアログボックスが出ます。データの取り込みを行う場合には <Scan> ボタンをクリックして下さい。コンピュータがワークロムを認識するとプログラムが開きます。データ解析のみ行うときには <Analysis> ボタンをクリックします。

図 1-2 のダイアログボックスが表示したら、パワークロムユニットやパワーラプハードユニットの電源が入っているか、コンピュータと正しく接続されているかを確認して下さい。SCSI 接続の場合はコンピュータを始動する前にハードユニットの電源を入れて下さい。また SCSI 接続の場合は、SCSI チェーンのターミネションが正しいかも確認する必要があります。〈Quit〉 ボタンをクリックするとプログラムは閉じます。もし接続が正しくされていて電源も入っている状態でこのダイアログボックスが表示される場合は、ハードウェアの取扱説明書を参照して下さい。本書の 'Appendix B' にもいくつかのハードウェアのトラブルに関する問題を記載しています。

プログラムを終了する

プログラムに名前をつけた後に記録等を行わずに終了する場合には File メニューから 〈Quit〉 コマンドを選択して下さい。本書に沿って作業を進めるのであればプログラムは開いたまま、先に進んで下さい。

2

C H A P T E R T W O

基本的な操作方法

この章ではプログラムの概要と Easy Access ウィンドウやクロマトグラムウィンドウなどの基本的な機能の説明をします。また、手動サンプリングの方法や記録の限界についても記載しています。

また、Appendix A、[メニュー, 147 ページ](#)を参考にして PowerChrom のコマンドとメニュー項目の概略を把握して下さい。

プログラムの概要

パワークロムでデータを記録するには、Easy Access ウィンドウ [図 2-3, 11 ページ](#)か、File メニューの Run コマンド [図 A-1, 148 ページ](#)を使ってランをスタートします。ランは次のように実行します：

- ・ マニュアルモード、[15 ページ](#)；
- ・ メソッドテーブル、[93 ページ](#)、メソッドは時間を指定してアクション指定しておきます
- ・ シーケンステーブル、[95 ページ](#)、シーケンスはメソッドを自動的に反復します

ドキュメントとウインドウ

プログラムには Data、Calibration、Method、Sequence の 4 種類のドキュメントがあります：

- ・ **Data**：最大 999 ランまで記録できるデータを含むドキュメントです。各ランはいろいろな方法で表示させたり分析ができます [112 ページ](#)。データファイルにはそれを作成した時に使った Calibration、Method、及び Sequence ドキュメントも含まれています。データドキュメントのサンプルテーブルをエクスポートし、シーケンスドキュメントのコピーが作成できます [135 ページ](#)。データの各ランは消去、コピー、データドキュメントへの貼り付けができ、一つのファイルに幾つかの測定結果を組み合わせ保存できます [97 ページ](#)。
- ・ **Calibration**：測定するサンプルに対して検出器の応答の基準となるデータを含むドキュメントです。ここにはピーク面積に対する化合物の定量化に関するパラメータ、リテンションタイムが記録されます。詳細は [See 70 ページ](#) を参照して下さい。
- ・ **Method**：ユーザーがハードウェアをコントロールして測定条件を設定します。ランの長さ、最小ピーク面積やスキム比などのピーク検出の条件を設定します [71 ページ](#)。メソッド内の情報はデータファイルのランインフォに記録されます [図 6-19, 129 ページ](#)。メソッドを使ってデータを収録すると、メソッド自体のコピーはデータファイル内にはめ込まれます。
- ・ **Sequence**：キャリブレーション、メソッド、印刷まで全てユーザーが管理しながら複数のランを自動記録する為のドキュメントです [80 ページ](#)。シーケンスドキュメントで複数のメソッドを連続的に使い、どのランにはどのキャリブレーションデータを使う

図 2-1

ドキュメントアイコン



Data



Calibration



Method



Sequence



Settings

かが設定できます。シーケンス内の情報はデータファイルのサンプルテーブルに記録されます [129 ページ](#)。

Data、Calibration、Method、及びSequence の各メニューはそれに対応するドキュメントを開いておけば表示します [図 A-4, 149 ページ](#)。これらのメニューには、そのドキュメント形式に特化したコマンドが含まれています。

図 2-2
ドキュメントに含まれるウインドウ

Data document	Calibration document
クロマトグラムウインドウ ピークレポートウインドウ ランインフォウインドウ サンプルテーブルウインドウ (メソッドウインドウ) (キャリブレーションウインドウ)	キャリブレーションテーブルウインドウ
	Method document
	メソッドテーブルウインドウ
	Sequence document
	サンプルテーブルウインドウ (メソッドウインドウ) (キャリウインドウ)

主な機能について コントロールと表示

- ・ 2台の検出器からのクロマトグラムはチャンネル 1 とチャンネル 2 に表示され、ポンプのグラジエントが 3 チャンネル目に画面表示します [図 2-11, 17 ページ](#)。クロマトグラムのデータは記録中にも、記録後にも表示します。
- ・ データが表示されているウインドウの縦軸横軸の設定も自在で、最適な条件で表示できます [27 ページ ~ 28 ページ](#)。
- ・ 表示線や表示カラーなどの形式はいくつかのオプションから選択でき、検出したピークにはいろいろな形式で名前をつけることができます ([30 ページ](#))。
- ・ メソッドやシーケンスなどのドキュメントは表形式で表示され、表の段落は使いやすいように編集可能です。また、各段落は別のドキュメントの段落にコピー & ペーストができます ([36 ページ](#))。
- ・ テーブルの行データはコピーして、別のテーブルに貼り付けできます ([40 ページ](#))。

- ・ 検出器のレスポンスカーブでは検出器の反応が可視的に確認できます ([69 ページ](#))。

解析

データは、各ランが終了すると自動的に解析されます。データ解析後でもキャリブレーション等を調整し直して再解析することも可能です。各ランは番号付けされ、ボタンをクリックするだけで各ランを画面に表示できます。クロマトグラムは拡大、縮小が自由にでき、見たいデータを拡大して詳細に見ることも可能です。複数ランを重ね合わせることができ三次元表示をする事も可能です。別のドキュメントからのデータを取り込んでデータの比較もすることができます。

その他の機能

メソッドはピークの検出や算出を詳細に調整して幅広いクロマトグラフィの条件に対応します。キャリブレーションは複数の内部標準、外部標準、リファレンスピークが使える、リテンションタイムの微妙なずれにも対応します。入力自動的に更新します。検出器のレスポンスカーブはグラフとして表示します。複雑なクロマトグラム（極性が逆のピークなど）は図形として編集でき、時間ベースラインの変更、ピークの追加やスキーム処理、重なり合っているピークの分割機能等を使って調整できます ([手動でピークを修正する, 115 ページ](#))。設定はいつでも任意に変更でき、編集、再演算処理や、その解除も自由に行うことができます。

カスタマイズ

プログラムは用途に合わせてカスタマイズすることができます。コントロールやコマンドメニューはロックしたり、隠したり、変更が可能ですので、プログラムを簡素化して単一タスクの処理に利用できます。[138 ページ](#)を参照。

プログラムを始動する

この取扱説明書を読む際は、実際にプログラムの各コマンドやセッティングを操作しながら読むことをお勧めします。まず、ハードウェアが正しく接続され、電源が入っていることを確認して下さい（ハードウェアのオーナーズガイドを参照）。ハードウェアを使わないで既存のデータファイルを開いてプログラムを解析専用を使う場合は、プログラムを立ち上げてからダイアログボックス [図 1-2, 5 ページ](#) で Analysis オプションを使います。



Shortcut to PowerChrom

ショート
カットアイ
コン



PowerChrom

プログラムア
イコン

Windows PC ではデスクトップの PowerChrom ショートカットアイコンをダブルクリックするか、スタート > すべてのプログラム > eDAQ > PowerChrom コマンドメニューで始動します。

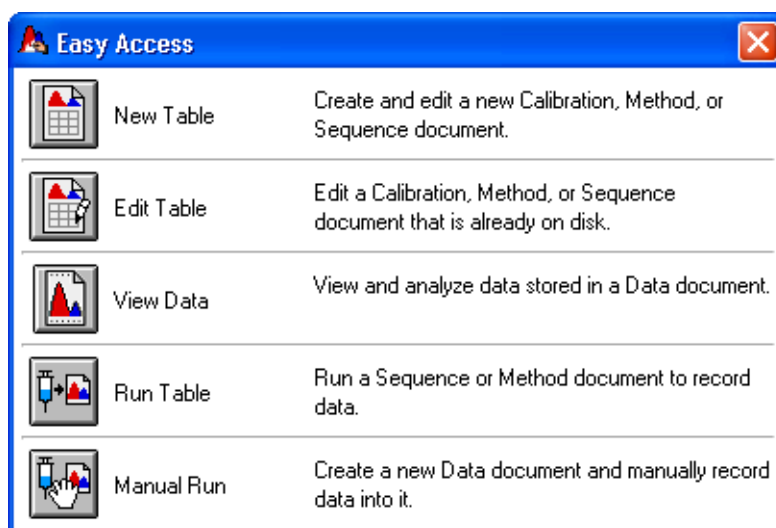
Mac ではプログラムを始動するには PowerChrom のプログラムアイコンをダブルクリックして開いて下さい。

Easy Access

プログラムを開くと、[図 2-3](#) のよう Easy Access ウィンドウが表示します。このウィンドウは Windows メニューの Easy Access コマンドからも選択できます。

図 2-3

Easy Access ウィンドウ



各オプションの説明が各項に載ってますので、そのボタンをクリックして選択します：

- ・ **New Table** : キャリブレーション、メソッド、シーケンスドキュメントのメインウィンドウが表形式で出ます 図 2-3。ボタンをクリックすると New Table ダイアログボックスが出ますので、作成するテーブルのラジオボタンをクリックします。
- ・ **Edit Table** : キャリブレーション、メソッド、シーケンスのメインウィンドウは総て表形式です。Edit Table ボタンを使って Open Table ディレクトリーダイアログボックス 図 2-6 を呼び出し、以前に作成したドキュメントを開き編集します。

図 2-4

New Table ダイアログボックス

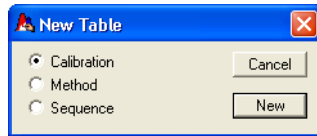


図 2-5

Open Table ディレクトリーダイアログボックス

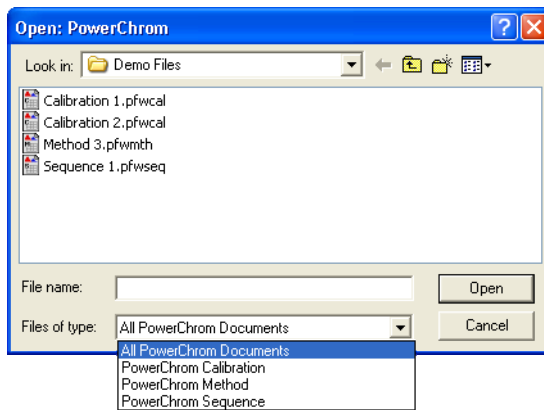
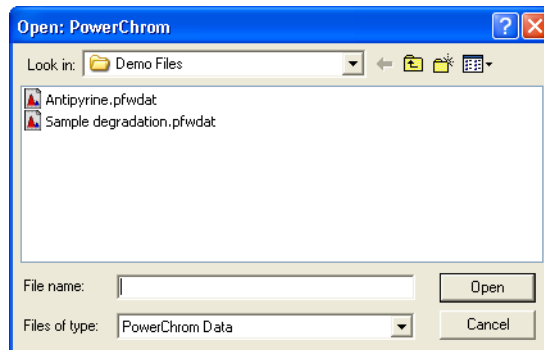


図 2-6

Open Data ディレクトリーダイアログボックス



・ **View Data** ボタンを選んで Open Data ディレクトリーダイアログボックス 図 2-6 を呼び出し、以前に作成したデータドキュメントを開きます。

・ **Run Table** ボタンを選んで Run Table ディレクトリーダイアログボックス 図 5-2, 93 ページ , を呼び出して、ディスクに保存してあるメソッドやシーケンスドキュメントを使います。そのラジオボタンから使用するテーブルの形式を選びます。

・ **Manual Run** : 手動サンプリングを行う時に使用します。このボタンをクリックすると Manual Sampling ダイアログボックス 図 2-9, 15 ページ が表示します。マニュアルサンプリングは 15 ページ で詳しく説明します。

ファイルを開く

保存してあるドキュメントやファイルを開くにはそのアイコンをダブルクリックします。又は、PowerChrom ソフトウェアを開き、File メニューから <Open...> を選んで保存してあるファイルを開きます。Open ディレクトリーダイアログボックス 図 2-7 が表示します。ポップアップメニューでファイルの形式を選ぶと、その一覧がスクロールリストに載ります。

図 2-7
Open ディレクトリーダイアログボックス

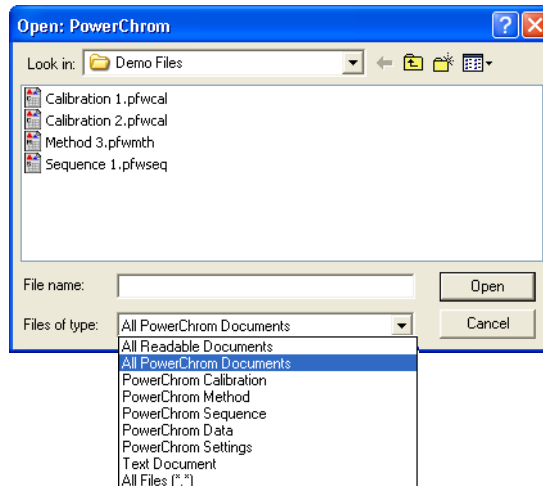
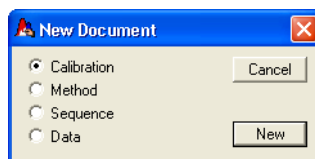


図 2-8
New Document ダイアログボックス



開きたいドキュメントを選んで <Open> ボタンをクリックするか、直接そのアイコンをダブルクリックするとそのドキュメントが開きます。

新規ドキュメントを作成する時は File メニューから <New... > コマンドを選び、New Document ダイアログボックスを呼び出します。そこで作成するドキュメントのタイプを選択します。

<New > ボタンをクリックして下さい。新しいドキュメントを作成するためのウインドウが表示されます。初期設定では未名称のウインドウがフル画面サイズで表示されますが、ウインドウの大きさは変更できますし、それをそのファイルに保存できます。

この説明書を読みながらデモンストレーションファイルを利用し、操作しながら読み進めるのが良いでしょう。オリジナルファイルを保護するために、ファインダー上(デスクトップ)にデモンストレーションファイルを違う名前で作成し、コピーを利用して動かしていくと安心です。

プログラムを終了する

開いているウインドウを総て閉じるには (Eassy Access ウインドウも含め)、<Option > キー (Macintosh) を、または <Alt > (Windows PC) を押しながら File メニューから <Close All... > を選びます。プログラムを終了するには、File メニューから <Quit > (Mac) か <Exit > (Windows) を選びます。 .

ウインドウを閉じるときやプログラムを終了する時に、何か変更箇所がある場合には必ずダイアログボックスが表示し、データを保存するかどうかを確認できます。

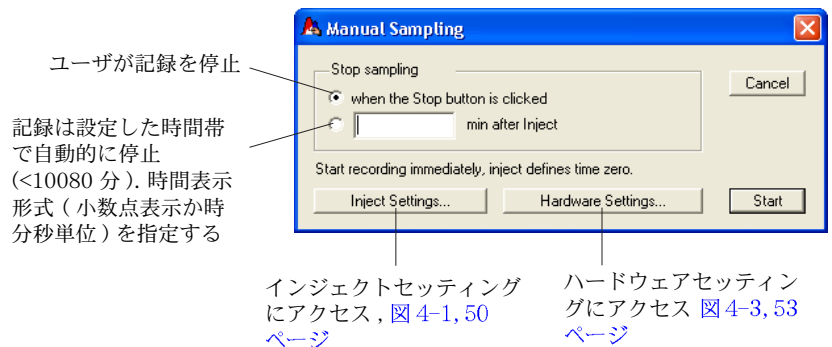
マニュアルサンプリング

マニュアルサンプリングは一番シンプルなデータの取り込み方法です。検出器の出力をワークロムのハードウェアに接続します。メソッドやシーケンスドキュメントに進む前に、このマニュアルサンプリングから始めてプログラムに慣れて下さい。

手動サンプリングを始めるには、Easy Access ウィンドウ [図 2-3, 11 ページ](#)の Manual Run ボタンをクリックして下さい。Manual Sampling ダイアログボックス [図 2-9](#)が表示します。このダイアログボックスで、記録終了の時間を停止するまで（初期設定）にするか、サンプルをインジェクションした後の時間を指定して終了させるかを設定します。また、< Hardware Settings... > と < Injection Settings... > で記録の開始時間の設定とハードウェアの入力シグナルの設定を行います。

Manual Sampling ダイアログボックスの < Start > ボタンをクリックして下さい。未名称のデータドキュメントが開き、サンプリングの状態を表すステータスパネル ([図 2-10](#))、クロマトグラムウィンドウ ([図 2-11, 17 ページ](#)) とランミニウィンドウ ([図 2-12, 21 ページ](#)) が出ます。記録中はクロマトグラムを観察することはもちろん、他のウィンドウを開き別の作業をすることも可能です。

図 2-9
Manual Sampling ダイアログボックス



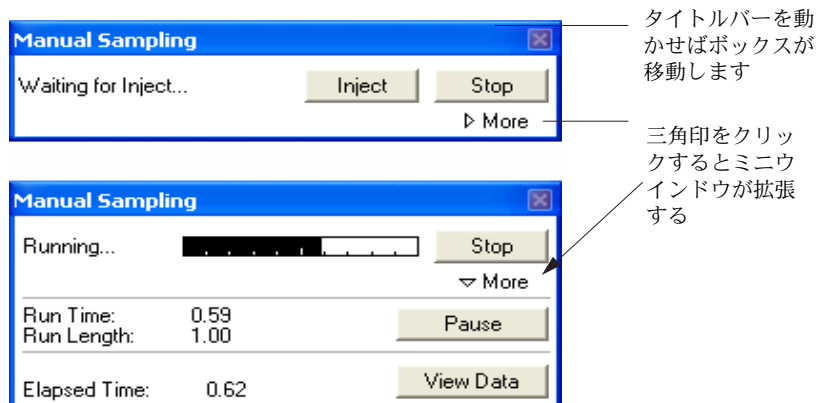
ステータスパネル

ステータスパネルは常時画面のどこかに表示しています。ステータスパネルは記録の状態を表示します。タイトルバーをドラッグすると画面上を移動します。パネル右下にある < More > の三角をクリックすると、[図 2-10](#) のような表示に変わります。ハードウェアに接続した

インジェクション信号の接点リレーでサンプルインジェクションの時間をトリガーします。手動でインジェクション信号を入れる場合は <Inject> をクリックするか <Command-J> (Macintosh では **⌘-J**) 又は <Ctrl-J> (Windows PC) を入力します。

図 2-10

Status Panel ミニウィンドウ (マニュアルサンプリングの時)



記録が設定時間に達すると、ステータスパネルに "Finished" のメッセージが出ます。<OK> ボタンをクリックするとタイム表示に変わります。データの収録が終わったら <Stop> ボタンをクリックして終了します。ステータスパネルは閉じます。

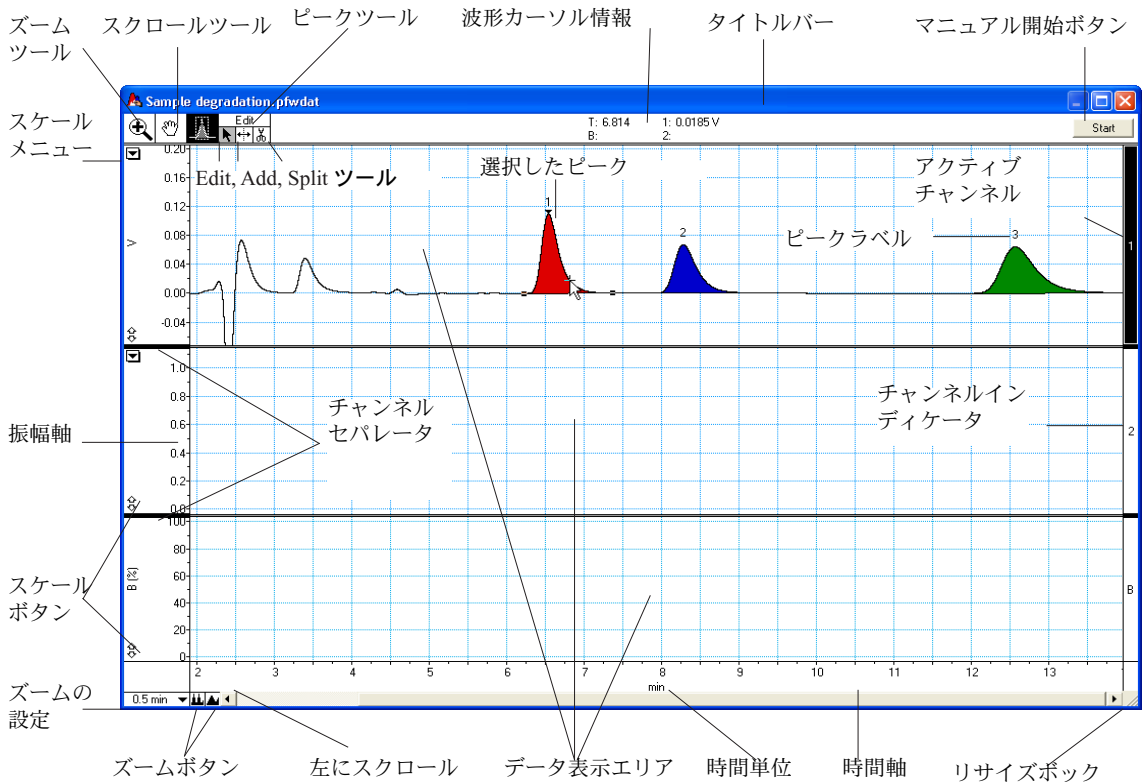
マニュアルサンプリングでは <Pause> ボタンはサンプリング時間を指定したときだけ利用でき、一旦停止して時間を延長します。指定した時間では短すぎる溶出ピークの記録に便利です。演算処理にはこの機能は関係しませんが、インジェクションからの経過時間には関係します。別のドキュメントやウィンドウを開いている場合、拡張表示したステータスパネルの <View Data> ボタンをクリックするとクロマトグラムが呼び出せます。

マニュアルランの解析

指定したマニュアルサンプリング時間が終了すると、そのランは自動的に解析されます。サンプリングを <Stop> ボタンを使って終了した場合は Data メニューから <Analys Run> を選べば、そのランのピークを検出します。何れの場合もデフォルトメソッドを使って解析します。詳細は [デフォルトメソッドとデフォルトセッティング, 132 ページ](#) を参照下さい。

図 2-11

Data ドキュメントのクロ
マトグラムウインド




クロマトグラムウインドウ

Data ドキュメントには4種類のウインドウがあります：クロマトグラム、ピークレポート、ランインフォ、サンプルテーブルの4種類です。データドキュメントを初めて開くと、図 2-11. の様なクロマトグラムウインドウが表示します。クロマトグラムウインドウをアクティブウインドウに切り替えるには、Windows メニューから <Chromatogram > を選びます。マニュアルサンプリングを終了してステータスパネルが閉じると、クロマトグラムウインドウが前面に出ます。クロマトグラムウインドウには振幅軸を挟み、軸コントロールエリアとデータ表示ウインドウが含まれています。振幅軸の左側には

縦軸サイズをコントロールするボタンがあります。振幅軸の右側はデータを表示するウィンドウで、取り込んだクロマトグラムはここに表示されます。ウィンドウの周りには幾つかのコントロールがあります。

基本的なウィンドウコントロール

画面上部にはタイトルバーにドキュメント名が表示します。タイトルバーをドラッグするとウィンドウが画面上を移動します。タイトルバー左端にはクローズボックスがあります。クリックするとウィンドウが閉じます。バー左側にはズームボックスがあり、クリックするとウィンドウの大きさが変わり拡大縮小します。記録したデータの分解能は表示の分解能とは無関係です。

スクロールバー  は画面上に表示するランをスクロールするために使います。矢印ボタンをクリックすると少しずつ移動し、押したままにすると押している間移動します。一度にたくさん移動する場合にはスクロールバー内のボックスをドラッグして下さい。ボックスと矢印ボタンの間の灰色部分をクリックすると画面一つ分左右に移動します。

クロマトグラムの軸

画面下方に表示するクロマトグラムの横軸は時間を示します。0時間とはインジェクションの開始時間、またはインジェクションポイントが設定されていない時に限り記録開始時間のことを指します。インジェクションの開始以前の時間はマイナスで表示されます。時間軸をダブルクリックすると標準記録スケール（1デジテーションが1分）と全データ表示が切り替わります。縦軸は記録したデータの振幅を示します。各チャンネルの振幅軸のスケールはハードウェアの設定レンジによって初期決定されていますが、スケールポップアップメニューで軸サイズの変更ができます。軸の左下にあるスケールボタンを使えば軸の変更は任意にできます。振幅軸をダブルクリックすると標準記録スケールと全データ表示（最大ピークの振幅が軸の最大値になります）の切り替えができます。


データ表示エリア


取り込まれたデータは縦横軸に囲まれたクロマトグラムウィンドウに表示します。初期設定では2チャンネル表示されていますが、ポンプチャンネルは隠れています。チャンネル間のセパレータをドラッグするとチャンネルの幅が変更し、一方のチャンネルを隠してしまうこと





もできます。チャンネルセパレータをダブルクリックすると、チャンネルの幅はファイルが開いた時の状態に戻ります。

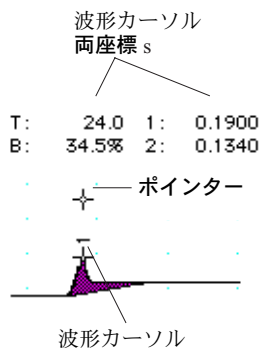
編集ツール

ツール上をクリックしポインターの機能を指定します：

・ **ズームツール**  はデータの一部を拡大して詳細表示させたい時に使用します。詳細表示させたいデータエリアをドラッグするか、時間軸上の選択範囲で全チャンネルを選び、その場所をダブルクリックします。詳細は [ズームビュー, 113 ページ](#) を参照してください。

・ **スクロールツール**  はデータ表示エリア上のデータをスクロールするために使います。このツールをドラッグしてデータ表示エリア上を動かすと、その速さでデータが移動します。データの移動はマウスのボタンを放した時か、データの開始、または終了点に達した時に止まります。スクロールツールはポインターがデータ表示エリアにある時に <Option> キー (Macintosh) か、<Alt> キー (Windows) を押すとハンドマークに変わり使用可能になります。

・ **ピークツール**  は検出したピークの編集に使います。このツールには3種類のボタンがあり、使用しているボタンは3つのボタン上に表示します。**Edit**  ボタンはピークの開始、終了時間やベースラインを変更するために使います。**Add**  ボタンは検出されているピークの追加や重なり合っているピークをスキーム処理するのに使います。**Split**  ボタンは一つのピークを2つに分けるために使います。詳細は [手動でピークを修正する, 115 ページ](#) を参考にしてください。



波形カーソル表示

スクロールツールを使用している時以外は、ポインターで波形をトレースすることが可能です。データ表示エリアにポインターがある時はポインターは十字型に表示しますので、波形に沿って移動させると画面上部にそのポイントでの時間と振幅が表示します。

タイムスケールボタン

タイムスケールボタンをクリック  すると時間軸の伸縮ができます。File メニューの <Print Window...> コマンドを使ってクロマトグラムを印刷すると、モニター上のスケールで印刷します。しかし通常は Display メニューの <Print Layout> で印刷するスケールを指定してから File メニューの <Print Window...> で印刷して下さい。



Zoom ポップアップメニュー

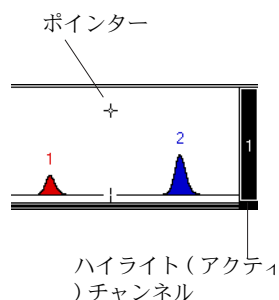
ズームポップアップメニュー

ズーム表示からズームポップアップメニュー **0.5 min ▼** が表示しますので、直接スケールに関するコマンドが選択できます：

- ・ **Revert Scale** を選択すると縦横軸共に変更する前の表示に戻ります。
- ・ **Zoom Selection** は選択したデータを拡大表示します。データが選択されていない時は使用できないように薄色のダイム表示になります。
- ・ **Standard Scale** を使うと縦横軸共に標準表示（縦軸はハードウェアのレンジ設定通りに、横軸は1デビジョン当たり1分）に変わります。
- ・ **Show All Data** を指定すると縦横軸は全データが画面に表示するスケールに変わります。

Start ボタン

データドキュメントの終了後に続けて次の測定を行う時は、ウインドウ右上に表示されている Start ボタン **Start** をクリックして下さい。Manual Sampling ダイアログボックス (図 2-9) が表示します。設定した後、ダイアログボックスの < Start > ボタンをクリックすると、ステータスパネル (図 2-10) が表示し、測定可能になります。記録中はステータスパネルに < Stop > ボタンが表示しますので、クリックすれば記録を止めることができます。



ポインター

クロマトグラムウインドウ上のポインターは画面上の位置や使用している編集ツール (Zoom、Scro、Edit) によって形が変わります。またポインターを移動しても、その機能を示す形が変わります。例えば、左記エリアでは **+** に変わります。ポインタを一つのチャンネルに合わせクリックすると、そのチャンネルがアクティブになり強調表示します。この機能はチャンネルの重ね合わせ表示の時に便利です。

ランミニウインドウ

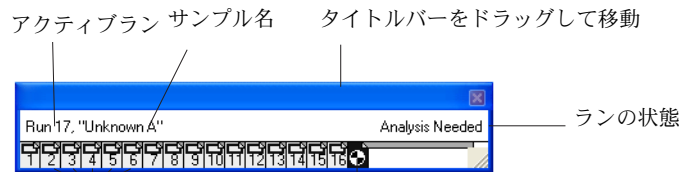
ランミニウインドウ 図 2-12 は Data ドキュメントがアクティブな状態の時は常に画面上に表示しています。タイトルバーをドラッグすると好きな位置に移動させることができます。タイトルバー左下にはアクティブランの番号が、右下にはアクティブランのステータスが表示

します。例えば、`マニュアル編集が実行されたので解析が必要`などと表示します。

検索

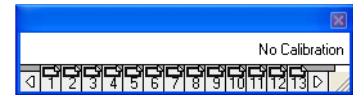
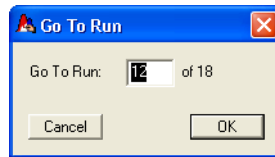
各ランには測定された順に番号が付きます。ランミニウインドウの下に番号のついたボタンが並び、ボタンをクリックするとそのランが表示します。反転表示されているランボタンは現在アクティブであることを示しています。<Command>(⌘)キー (Macintosh) か、<Ctrl>キー (Windows PC) を押しながら右または左矢印キーを押すと一つ隣のランをアクティブにすることができます。ランボタンを押すと Go To Run ダイアログボックスが表示しますので表示させるランの番号を入力し、<OK> ボタンをクリックしても他のランに移動できます。

図 2-12
Run ミニウインドウ ランボタンを押すポップアップメニューが出ます。



ランボタン、押しながら Go To Run ダイアログを呼び出す 図 2-13

図 2-13
Go to Run ダイアログボックス



ラン数が多いとスクロールボタンが出てリスト表示がスクロールできます。

ランの重ね合わせ表示

Overlay メニュー 図 A-7, 150 ページの <run overlay> とランボタンを使って、複数のランの重ね合わせ表示し比較することができます (, 33 ページ)。

記録

メソッドやシーケンスを使う自動記録やマニュアルランによる手動記録に関わらず、データの記録は全て同じ方法で行われます。検出器の出力端子から出力された信号はデジタル処理されて 30 秒毎にハードディスクに収録されます [データバッファリング, 139 ページ](#)。記録した生データはハードウェアの設定も含めて変更することはできません。

記録中のディスプレイ

クロマトグラフィックデータは左から右に向かって表示されていきます。画面がいっぱいになると画面は左方へスクロールしていきます。測定中のランの始めのデータを見るにはスクロールバーを使ってデータをスクロールして下さい。


バックグラウンドレコーディング

記録中は何もできませんので、コンピュータで別の作業をすることも可能です。記録中のランの既に記録が終わっているデータを見たり、全く別のアプリケーションソフト、例えばワープロプログラムソフトなどで作業しながらバックグラウンドでクロマトグラムの記録もできます。しかし、インターネットブローカーや e-メール、その他ネットワーク関連のソフトウェアはお奨めできません。これらは随時、無原則にコンピュータを占有しますので、記録データを壊す恐れがあります ([システムへの妨害, 24 ページ](#) を参照)。

時間軸に沿ったスクロールバーを使えば既に記録したデータがスクロール表示しますし、その間も新たなデータは記録されています。スクロールはクロマトグラムの右端までが限度で、それ以上はズームボタンを使って時間軸を圧縮すると見ることができます。

サンプリング中でもそのクロマトグラムウィンドウは随時アクティブウィンドウに表示します。これにはステータスパネルを拡張して View Data ボタンをクリックします。バックグラウンドでのランやシーケンスが終了するとビーブ音で知らせてくれます。

記録時間

Apple ()メニュー (Macintosh) か、Help メニュー (Windows PC) から <About PowerChrom...> [図 2-14](#), を選択するとダイアロ

グボックスが表示し、その下の段にプログラムに割り当てられるメモリ量が出ます。

Macintosh では一つのランに記録できる最大時間は、一次的にはプログラムに割り当てたメモリで決まります。プログラム作動中メモリ不足であることが分かった場合は一度プログラムを終了し、ファイндаに戻してからファイルメニューから <Get Info> を選択して下さい。情報が表示されたら Preferred Size ボックスの数字を増やして使用メモリを大きくします。Windows PC ではシステムが自動的にメモリを割り当てます。

図 2-14

空きメモリ：About ダイアログボックスの下段に表示します

Data buffering to disk: 256 MBytes available



記録時間の制限

記録は1サンプルあたり4バイト使用するので、1秒間に100サンプル、2チャンネルで記録した時には $2 \times 4 \times 100 = 800$ バイト(0.8K)使用することになります。一般的な1チャンネル、20サンプル/秒の記録を15分間行くと $20 \times 4 \times 15 \times 60 = 72000$ バイト(72K)のメモリを使うことになります。

記録が終了したランは自動的に圧縮されるため、大抵の場合記録に使用したメモリ量よりも少ないメモリで保存することができます。圧縮の効率はピークの状態によります。ピークが緩やかで変化に乏しい場合にはデータはかなり圧縮されますが、複雑で急激な変化が多い場合には圧縮はあまりされません。プログラムの圧縮能力はとても優れたもので、通常はファイル容量の65～75%までに圧縮します。長時間記録する場合、変化に乏しいピークを測定する場合は相当量のメモリを必要としますが、大抵の場合、1ランの測定はそれほど長い時間を要しない為たくさんの測定ができます。

例えば、サンプリングスピードを100サンプル/秒とすると、1週間では使用メモリは約504MBになります。また、プログラムの限界として1Dataドキュメント当たりの最大測定ランは999迄です。

システムへの妨害

コンピュータへの情報の伝達を妨げる活動が幾つか存在します。その結果、データの喪失を被る場合があります。データの記録中は、フロッピーディスクへのコピー、またはフロッピーディスクからのコピーや、長時間マウスの保持はを避けて下さい。また、不必要なネットワーク活動やスクリーンセーバの使用は危険ですし、特に CPU のパワーが制限される古いコンピュータを使う場合などは問題を生ずる恐れがあります。

安定化電源 (UPS) は停電時にはデータ保護には有効です。

3

CHAPTER THREE

データディスプレイ

この章では、パワークロムのプログラムで利用できるクロマトグラム
ウインドウに関するディスプレイオプションについて説明します。

また、ウインドウのセットアップやカスタマイズ、表示単位や単位変
換についても詳しく説明します。

クロマトグラムのディスプレイ設定

ディスプレイセッティングの大部分はクロマトグラムウインドウに関するもので、パワークロムのプログラムの表示に関係しています([図 2-11](#), [17 ページ](#))。

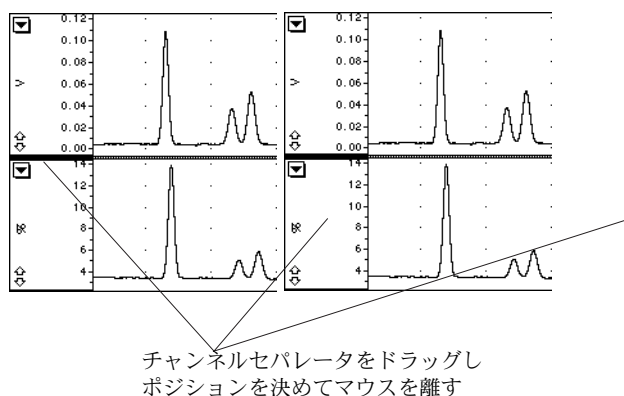
データディスプレイエリア

記録したデータは、振幅軸と時間軸とで囲まれたクロマトグラムウインドウに表示されます。初期設定では表示エリアは2チャンネルに均等に二分割されています(ポンプチャンネルは隠れています)。ウインドウの縦軸の幅はサイズボックスで自由に変更することができるほか、二つのチャンネルのデータを重ね合わせることも可能です。

チャンネルの表示サイズの変更

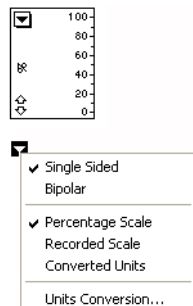
チャンネルの表示サイズを変更するには、チャンネルセパレータをドラッグします([図 3-1](#))。破線が出て移動する場所を示します。マウスボタンを離すとチャンネルの縦軸の幅が変更します。チャンネル幅のサイズは随時変更できます。チャンネル表示の幅を 25 mm以下に縮小するとテキストやコントロールの表示が出なくなります。チャンネルの最小の表示幅はその 1/2 です。セパレータをドラッグしていくと、チャンネル幅がゼロになるまで縮まります。

図 3-1
チャンネルの表示幅を変更する



振幅軸

各チャンネルの振幅軸のスケールは軸をドラッグするか、スケールボタンを使用するかはスケールポップアップメニューで調整します。入力信号のフルスケールはハードウェアセッティング (図 4-3, 53 ページ) か、入力アンプ (図 4-4, 55 ページ) で設定します。スケールボタンは各チャンネルの振幅軸の左下に付いています。スケールボタンで軸を調整するには、矢印をクリックすると段階ごとにスケールが変更されていきます (1,2,5,10 倍) :



- ・ **Single Sided** : 各チャンネルディスプレイの初期設定です。ディスプレイエリアの一番下が振幅軸の 0 になり、一番上がフルスケールになります。0 以下の値は表示しません。0 以下の値を表示するには 'Bipolar' オプションを選択するか軸をドラッグして下さい。

- ・ **Bipolar** : 0 を挟んでプラスとマイナスの領域を表示します。負のピークを見るにはこのオプションを選択して下さい。

- ・ **Percentage Scale** : 振幅軸の電圧値がフルスケールのパーセントで表示します。Hardware Settings ダイアログボックスで設定した検出器の入力レンジ電圧がフルスケールの 100% になり、単位は %fs で表示します。

- ・ **Recorded Scale** : 検出器からの出力電圧値をそのまま表示します。Hardware Settings ダイアログボックスで設定した検出器の入力レンジ電圧がフルスケールとなります。単位は設定した電圧に応じて V か mV で表示します。

- ・ **Converted Units** : Unit Conversion コマンドと共に使用することで自由に単位が設定できます。ここで単位を指定しないと検出器の出力電圧レンジで表示します。

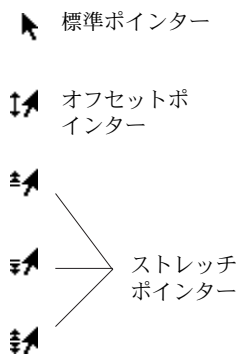
- ・ **Unit Conversion...** : このコマンドメニューを選択すると Units ダイアログボックスを表示し 図 3-23, 42 ページ、任意の単位が設定できます。

スケールボタンは 図 2-11, 17 ページ各チャンネルの振幅軸の左端に出ています。

上向き矢印をクリックすると軸は伸び、下向き矢印をクリックすると軸は縮み、段階ごとにスケールは変更していきます。振幅軸をシフトして引き伸ばしすることもできますが、シグナルの分解能はハードウェアセッティング 52 ページの入力設定で決まります。

図 3-2

振幅軸で変化するポインター



最良の条件は、超えない範囲で検出器からの最高出力に近い入力レンジに設定します。

ポインターは振幅軸周りのどこを指しているかによって形が変化します 図 3-2。振幅軸の左側では通常の形で表示します。ポインターが振幅軸上にある時はポインターの隣にマーカが出て、それぞれ違う働きを示します。スケール表示値の間にポインターがある時はポインターに両頭矢印のマーカが付き、スケールがドラッグ可能であることを示します。

軸スケールを変更すると、軸の単位表示も更新します。

オフセットかストレッチポインター 図 3-2 の時にマウスをダブルクリックすると、最大ピークがディスプレイウィンドウに収まるようにデータの表示方法が切り替わります (27 ページ)。標準ポインター の時にマウスをダブルクリックすると、Axis Labels & Scales ダイアログボックスにアクセスします (図 3-3, 29 ページ)。

時間軸

横軸は時間を示します。時間軸はクロマトグラムウィンドウの下方に出ます 図 2-11, 17 ページ、0 時間はサンプルインジェクションポイントか、サンプルインジェクションポイントを設定していない時にはランの開始時間を示します。それ以前の時間はマイナス表示で表されます。時間表示はディスプレイオプションで設定でき、小数点分単位と時 : 分 : 秒単位の形式があります。ポインターが の時に時間軸上をダブルクリックすると、全データの表示と標準表示 (1 デバイション当たり 1 分) とが切り替わります。ポインターが の時に時間軸の上か単位表示をダブルクリックすると、Axis Labels & Scales ダイアログボックスが表示します 図 3-3, 29 ページ。

タイムスケール

タイムスケールボタンをクリックすると 図 2-11, 17 ページ、時間軸が伸縮します。Print Window コマンドでランを印刷すると、画面表示のスケールでクロマトグラムが印刷できます。しかし通常は <Print...> コマンドを使い、Display メニューの Print Layout コマンド 図 5-17, 109 ページで時間軸の調整をします。

ズームポップアップメニュー



ズームポップアップメニュー

クロマトグラムウィンドウ [図 2-11](#), [17 ページ](#) の **0.5 min** ボタンは、1 デバイジョンあたりの分数でタイムスケールを表します。このボタンをクリックするとズームポップアップメニューが表示し、次のオプションが選択できます：

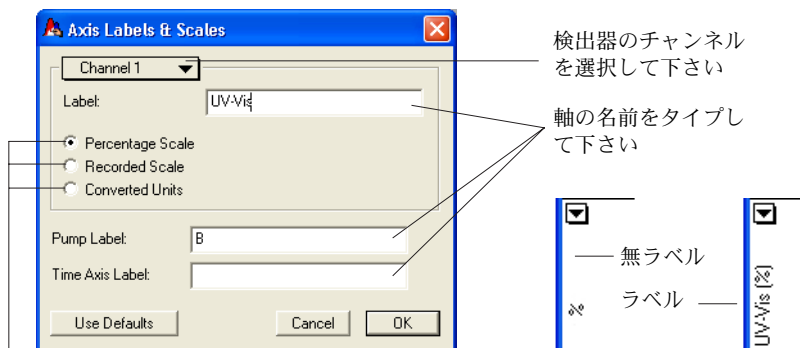
- ・ **Revert Scales** は縦横両軸の軸設定を変更前に戻します。
- ・ **Zoom Selection** はデータの範囲指定をした時だけ使用でき、指定した範囲を拡大表示します。
- ・ **Standard Scales** は両軸の軸設定を標準設定に戻します。標準設定とは振幅軸はフルスケールで時間軸は 1 デバイジョンあたり 1 分です。
- ・ **Show All Data** は両軸を調整して 1 ランのクロマトグラムデータの全てを表示します。

軸ラベル

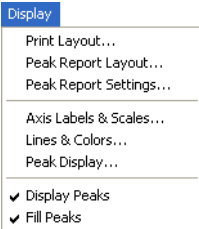
通常、振幅軸は電圧単位かパーセント、時間軸は時間の単位で表示しますが、必要に応じて各チャンネルの単位を設定することができます。記録しているデータの単位に対応する軸ラベルに変更するには Display メニューから <Axis Labels & Scales...> を選択するか、軸の単位表示（振幅軸では左を、時間軸は上）をダブルクリックすると Axis Labels & Scales ダイアログボックス ([図 3-3](#)) が表示します。

ラベルが無いと、軸単位だけが表示します。段落の表題には上付き文字や下付き文字も使用できます [表 3-1](#), [38 ページ](#)。

図 3-3
Axis Labels & Scales ダイアログボックス



表示単位のオプション [27 ページ](#)



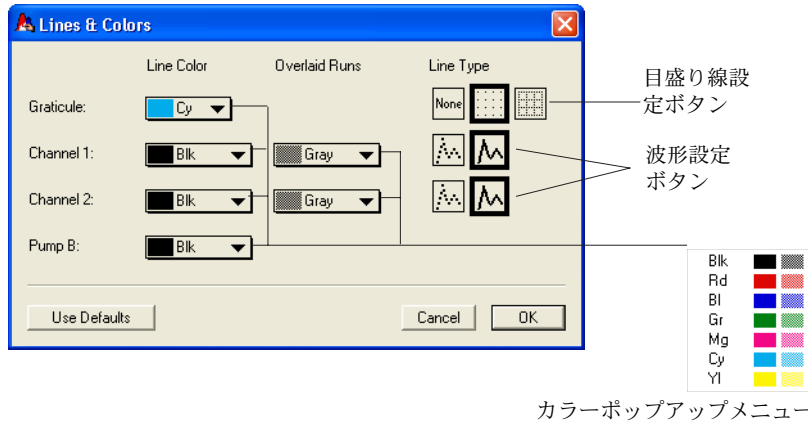
データ表示の線とカラー

Lines & Colours ダイアログボックス 図 3-4 には Display メニュー 図 A-6, 150 ページからアクセスできます。

目盛りボタン を使って表示グリッド (目盛り) を (点、線、なし) を選びます。

波形ボタン を使ってクロマトグラムを点表示にするか線表示するかを選択します。

図 3-4
Lines & Colors ダイアログ
ボックス

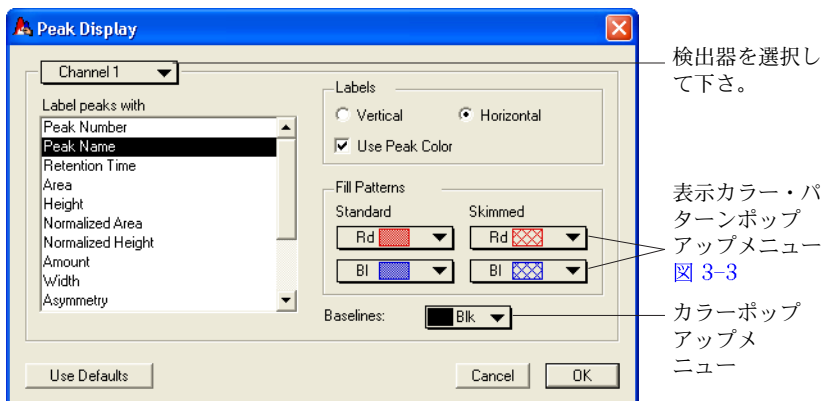


ピークディスプレイ

Lines & Colours ダイアログボックスで設定したクロマトグラムのディスプレイセッティングに加え、Peak Display ダイアログボックス 図 3-5 では検出したピークの表記方法と塗りつぶしカラーの設定をします。このダイアログボックスを呼び出すには Display メニュー 図 A-6, 150 ページから < Peak Display > を選択して下さい。

ピークディスプレイの設定は 2 チャンネル別々に行ないます。まず、ダイアログボックス左上のポップアップメニューで検出器のチャンネルを選択して下さい。ダイアログボックス左側のスクロールボックスからピークラベルの種類をクリックして選択して下さい。このラベルは Data ドキュメントの Peak Report ウィンドウにも使われます。右上の Labels の項からピークラベルの表示の向きを選択して下さい。Use Peak Color ボックスがチェックされていない場合にはラベルは黒色で表示します

図 3-5
Peak Display ダイアログ
ボックス

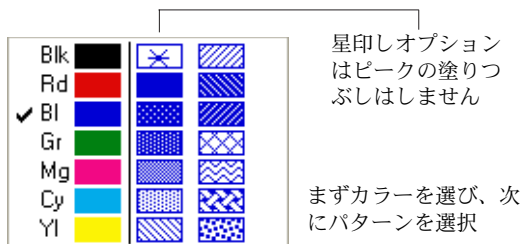


検出器を選択して下さ。

表示カラー・パターンポップアップメニュー 図 3-3

カラーポップアップメニュー

図 3-6
Color & Pattern ポップアップ



星印しオプションはピークの塗りつぶしはしません

まずカラーを選び、次にパターンを選択

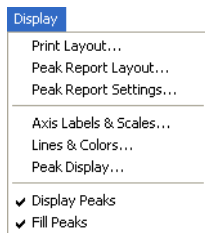
塗りつぶしパターン

クロマトグラムデータの記録が終了すると、自動的に検出したピークの中を塗りつぶして表示します。この塗りつぶし表示の設定は Colour & Pattern ポップアップメニュー 図 3-3 を使って設定します。標準ピーク、スキーム処理したピークを共に各 2 色で表示します。

パターンは色はキャリブレーションテーブルの Fill コラム (図 4-8, 59 ページ) か、Peak Report ウィンドウ (図 6-16, 123 ページ) の Fill コラムから選択します。

検出ピークの表示法

通常は Display メニュー (図 A-6, 150 ページ) の < Display Peaks > と < Fill Peaks > のチェックマーク (✓) が付いており、クロマトグラムデータの記録が終了するとピークを自動的に検出し、ベースライン上のピークの中は塗りつぶしで表示されてピークラベルも付きま



< Display Peaks > のマークを外すと < Fill Peaks > も自動的に無効表示になり、クロマトグラムの波形だけを表示します。Fill Peaks コマンドからマークを外すとラベル表示はしますがピークは塗りつぶしては表示しません。これでコマンドメニューの状態やランミニウィンドウ [図 2-12, 21 ページ](#) から未解析ランと区別できます。

図 3-7

Display Peaks コマンドと Fill Peaks コマンドの効果

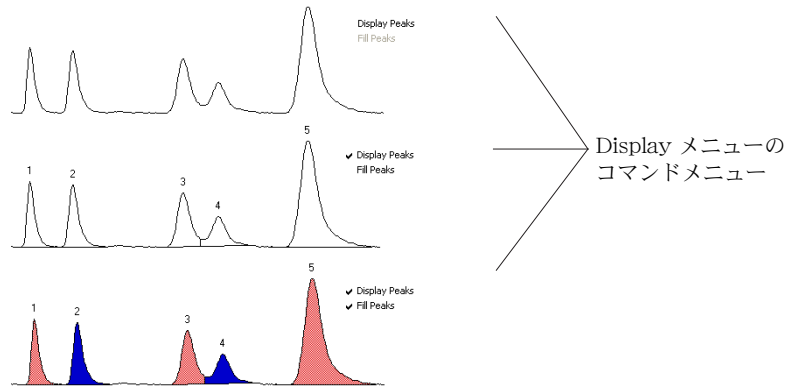
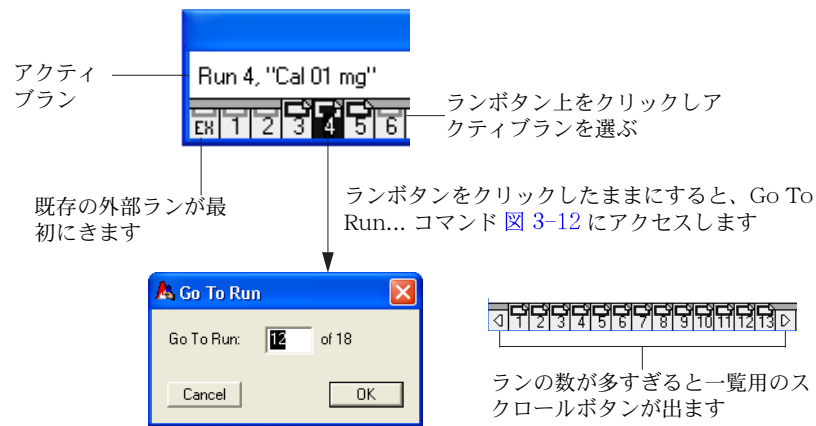


図 3-8

ランボタンを使う : Run ミニウィンドウと Go To Run ダイアログボックス



< Fill Peaks > をオフにしてマークを外すと、ピークは塗りつぶし表示しません。ベースラインとピークラベルは表示します [図 3-3](#)。

< Fill Peaks > をオフにしてマークを外すと、ピークは塗りつぶし表示しません。ベースラインとピークラベルは表示します

ランボタンの使い方

ランミニウインドウのランボタンはランの状態を示し、データの検索や表示に使用します。ランミニウインドウのランボタン [図 3-8](#) のランボタンの番号をクリックすると、表示がそのラン番号のクロマトグラムに変わります。<Ctrl> キー (Macintosh では **⌘** キー) を押しながらキーボードの左右矢印キーでも表示するクロマトグラムが変更できます。特定のクロマトグラムに移動するには、ランボタンを押すと表示するポップアップから <Go To Run...> を選んで下さい。

外部ランのランボタン [121 ページ](#) は、'EX' と表示されリストの最初に出ます。<Go To Run> ダイアログボックスで 'X' を入力すれば、外部ランに移動します。

チャンネルの重ね合わせ

オーバーレイ (重ね合わせ) メニュー [図 A-7, 150 ページ](#) はデータドキュメントのクロマトグラムウィンドウがアクティブの時にアクセスできます。



初期設定では重ね合わせ表示をしない設定になっています。チャンネルを重ね合わせる時には、Overlay メニューから <Overlay Channels> [図 3-9](#) を選択して下さい。二つのクロマトグラムは各チャンネルのスケールで表示しますので、通常の振幅軸では描画されません。

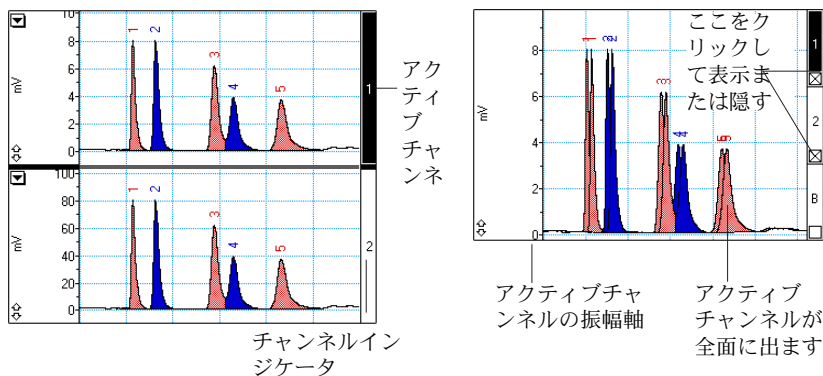
軸の伸縮 ([28 ページ](#)) は全ての可視チャンネルに反映します。アクティブチャンネルだけを変更するには、<Ctrl> キー (Macintosh では **⌘** キー) を押しながら軸を操作して下さい。

ランの重ね合わせ

ランのクロマトグラムデータ [図 3-3](#) の重ね合わせ表示も可能です。ただし、チャンネルを重ね合わせ表示している時には同時にランの重ね合わせはできません。

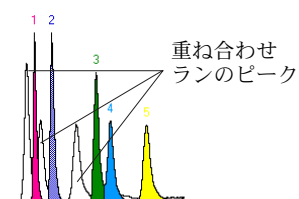
オーバーレイにするには重ね合わせるランを選択し、Overlay メニューから ([図 A-7, 150 ページ](#)) <Overlay Runs > を選択して下さい。三次元的に重ね合わせをするには Overlay メニューから <Overlay Runs 3-D> を選択して下さい。重ね合わせ表示を解除するには <Overlay Off> を選択します。

図 3-9
オーバーレイチャンネル

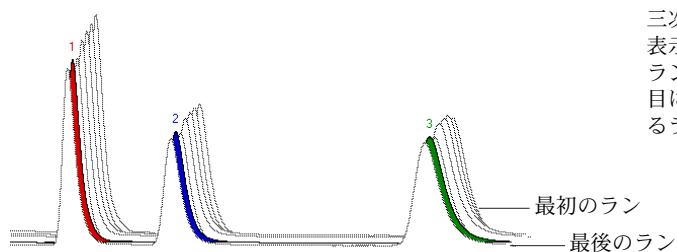


重ね合わせたデータは後から前に向かって順番に表示します（**チャンネルの重ね合わせ, 33 ページを参照**）。アクティブランは常に重ね合わせに含まれてカラー表示します。ただし、通常のリネアップ表示ではアクティブランが前面に表示し、それ以外のデータはランの順番に沿って表示します。総てのランを重ね合わせるには Overlay メニューから <Show All Run> を選んで下さい。解除するには <Hide All> を選びます。Overlay メニューから <Runs> を選ぶとアクティ

図 3-10
クロマトグラムの重ね合わせと 3-D 表示：どちらの場合もカーソルはアクティブランに沿って移動します



通常の重ね合わせ表示：（ピークが塗りつぶし表示している状態）



三次元重ね合わせ表示：アクティブランは前から 2 番目に表示されているランです。

プランだけが表示します。個々のランはランボタンを使って重ね合わせ表示に加えます (35 ページ)。

重ね合わせ表示に支障があれば、Display メニューの <Display Peaks > や < Fill Peaks menu > を使って、ピークの塗りつぶしや模様が解除できます (31 ページ)。

三次元表示 (3-D) ではアクティブランの位置にかかわらず、ランの順番通りにデータが表示します。また、各ランの間隔は変更できません。3-D ランの重ね合わせでは、時間軸スケールはアクティブランのスケールに準じます。

図 3-11
ランボタンとオーバーレイ

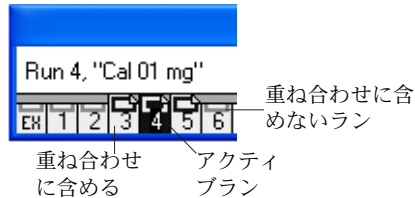
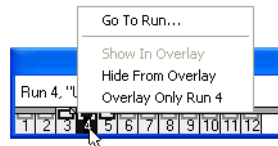


図 3-12
ランボタンポップアップメニュー



アクティブランと表示ランを選択

<Shift-click>, <Ctrl-click>, (Mac では **⌘**-click) と同じ

<Shift-click>, <Ctrl-click>, (Mac では **⌘**-click) と同じ

<Alt-click> (Mac では Option-click) と同じ

重ね合わせるランの選択

Display メニューのランオーバーレイコマンド (33 ページ) と組み合わせて、ランボタンで重ね合わせて比較するランを指定します。ランボタン上をクリックしたままにすると、Run button ポップアップメニュー 図 3-12 がアクセスしランが選択できます。



重ね合わせたランのランボタンは高くなり 、それ以外は低いボタンです  (図 3-11)。また、キーボードからもランの選択はできます。ランボタン上で <Shift-> か <Ctrl-click> (Macintosh では < **⌘**-click >) で選択できます。<Alt-click> (Macintosh では < Option-click >) でクリックした以外は全てオーバーレイランは隠れます。

図 3-13
ウィンドウのコントロール

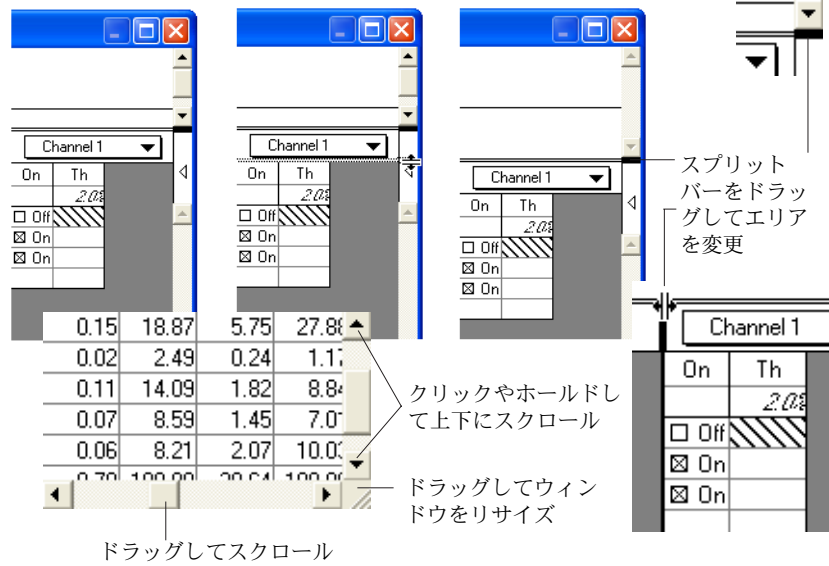
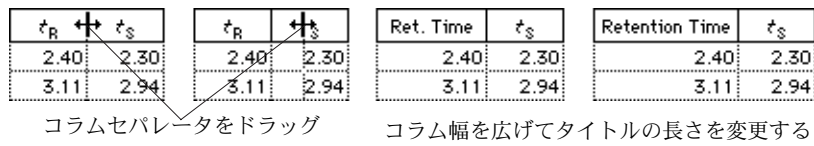


図 3-14
コラム幅の変更



テーブルの表記設定

データドキュメントのクロマトグラムウィンドウを除くほとんどのウィンドウは、表形式か表を含む形式で表示します。ここでは総ての表形式に共通する操作方法について説明します。

通常のウィンドウコントロール

表形式のウィンドウは2つの区画に別れています。それぞれの区画は大きさが変更できます。大きさを変更するには、2つの区画の間にあるスプリットバーのハンドル 図 3-13 にポインターを合わせてドラッグして下さい。スプリットバーをダブルクリックすると小ウィンドウの大きさが元に戻ります。

コメント部分の最小の高さは約 15 mm、表部分は約 45 mm です。スプリットバーを最小サイズ以上に移動すると、ゼロまで縮まり区画は隠れます (図 3-13)。

テーブルのコントロール

テーブル（表）の中段落は表計算の様にスクロールできます 図 3-13。

コラムのタイトル

表中のコラム幅はスプリットバーのように段落間のセパレータをドラッグして変更できます（図 3-14）。初期設定ではそれぞれの表題に合わせて必要最小限の幅で設定してありますので、表題に合わせて段落の幅を設定して下さい。

図 3-15
コラムタイトルの拡張と
Column ポップアップメ
ニュー

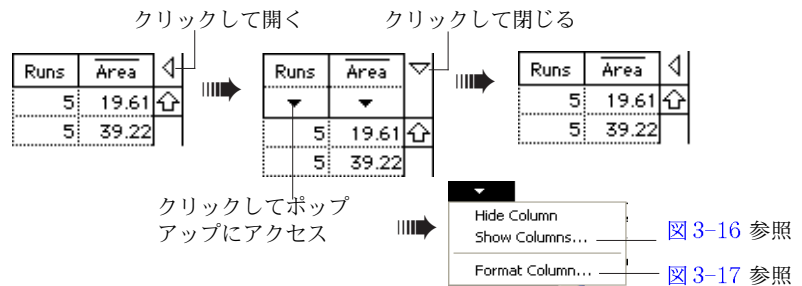
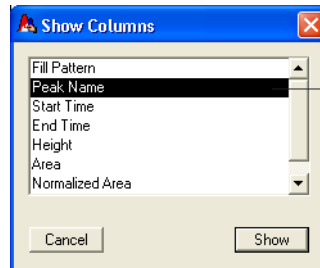


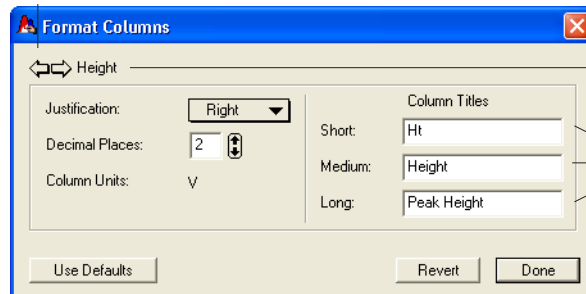
図 3-16
Show Columns ダイアロ
グボックス



エントリーをクリックして選択する
か、< shift-click > で複数のエント
リーを選択

隠れていたコラムがフルコラムタイトルで表
示します

図 3-17
Format Columns ダイアロ
グボックス



初期設定のコラム
タイトル（変更不
可）

文字入力欄に新コ
ラムタイトルを入
力

コラム間の移動（変更が適応）
ショートカットキー：Ctrl+ 左右矢印キー（Macintosh では ⌘ キー）

タイトルのフォーマットやレイアウトの設定、またコラムを隠したり再表示するには、ウインドウ右側の三角ボタンをクリックして下さい。これはタイトル拡張ボタン 4 で、クリックすると三角が下向き ▼ になりタイトル行が一行増えます (図 3-15)。この黒い三角ボタンをクリックするとコラムポップアップメニューが表示し、段落を隠したり、全段落を表示したり、表題のフォーマットや段落のレイアウトが設定できます。

▼ をクリックしてコラムポップアップメニューを呼び出します：

- ・ < Hide Column > はそのコラムを隠します。
- ・ < Show Columns... > コマンドは Show Columns ダイアログボックスを呼び出し 図 3-16、コラムを再表示します。
- ・ < Format Columns... > はダイアログボックスを呼び出し 図 3-17、コラムタイトルとレイアウトが変更できます。

3 種類 (大中小) の表示幅がありますが、表題の長さによって妥当なものが自動的に選択されて表示します。ただし、3 つの表示方法総てに入力する必要はありません。設定した表題がセルの幅に対して長すぎる時は途中で省略されて、(…) マークで表示します。セルの幅が十分広ければ、コラムエントリーの単位も表示します。表題には上付き文字やイタリア書体なども、Format Columns ダイアログボックス 図 3-17 の文字入力欄に対応コード 表 3-1 を使って導入できます。\$、_、《、》、÷などの特殊文字も表示できますが、最後のコラム表題には表示しません。テキストエントリーボックスには特殊文字の入力方法が示してあります。例えば、入力欄の ' ÷ t \$ R_' はコラムタイトルでは 't_R' と表示します。ここで Windows コンピュータの Alt-0247 など、<Alt> キーを押しながら Num Lock をオンにして 0247 と入力することを示します。

表 3-1
スタイル文字の入力

Windows	Macintosh	Text Entry Box	Example
Alt+0247	Option-/	Ita ™ lics	Italics
Alt+0171	Option-¥	Under ¤ score	Underscore
Alt+0187	Option-Shift-¥	Over ¤ strike	Overstrike
Shift+6	Shift-6	Super ^ script	Super ^{script}
Alt+0167	Option-6	Sub . script	Sub _{script}
Shift+hyphen	Shift-hyphen	^Nor _mal	Nor _{mal}

図 3-18

コラムタイトルをドラッグしてコラムを入れ替え

2. コラムのタイトル行にポインターを移動

Name	Ret. Time	Start Time	End Time
	2.4148	2.31	2.54
	3.1166	3.02	3.51

End Time
▼

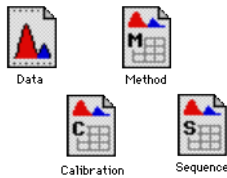
1. タイトル拡張ボタンを押して黒い三角ボタンを表示させる。

Name	Ret. Time	Start Time	End Time
	2.4148	2.31	2.54
	3.1166	3.02	3.51

3. 移動場所の横方向にドラッグ

Name	Start Time	Ret. Time	End Time
	2.31	2.4148	2.54
	3.02	3.1166	3.51

4. 入れ替え場所を確認しマウスを放す



コラムによっては特殊な設定方法で設定をしているものもあります。Peak Report の Width の項ではパーセンテージや小数点の設定を \$1、\$2 のように入力します (50%、0.5 と表示されます)。キャリブレーションの表では \$1 は高さや比率を意味します。これらの表記が初期設定の時点で使用されていない時には通常の入力方法で入力できます。

コラムの再調整

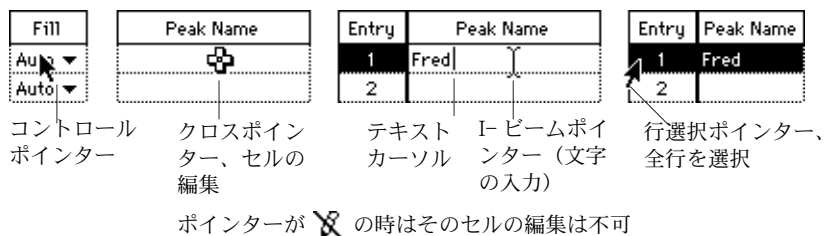
コラムのレイアウト機能を使っている際に図 3-15、コラム表示の順番も変更できます (図 3-18)。

レイアウトの保存

データの表示に関するウィンドウサイズ、表記列のレイアウトや表題、表示カラーや形式などのディスプレイセッティングは個々のドキュメント (キャリブレーション、メソッド、シーケンスドキュメント) の一部として保存できます。セッティングファイルはプログラムの包括的なセッティングとして保存されます。セッティングファイルは Edit>Preferences>Save Settings... で作成します (141 ページ)。

図 3-19

表記行を移動する時のポインターの変化



表示行の編集

本プログラムには表示用と編集用の 2 種類の基本的な表形式があり、表示用の表形式テーブルは (Run Info ウィンドウなど) クロマトグラムのデータが直接取り込まれるため、いくつかのセル以外は編集できません。しかし、このプログラムのほとんどのテーブルが編集できるものであり、これらのテーブルは同じような操作で編集できますし、テーブル同士で行のコピー & ペーストができます。

テーブル上ではポインターを移動した時に位置によってポインターの形が変わります。これらはポインターの機能を表しています (図 3-19)。

その他のアクション:

- ・ < Shift-クリックかドラッグ > で隣接行が選択できます。
- ・ < Ctrl-クリック > (Macintosh では -クリック) で個々の行を非選択できます。
- ・ 上下矢印キーで選択行を上下に移動します。

Edit	
Undo	Ctrl+Z
Cut	Ctrl+X
Copy	Ctrl+C
Paste	Ctrl+V
Clear	
Select All	Ctrl+A
Show Clipboard	
Copy Special...	
Export Peaks	
Delete Rows	Ctrl+K
Insert Rows	Ctrl+I
Repeat Rows...	
Collapse Rows	
Expand Rows	
Preferences	

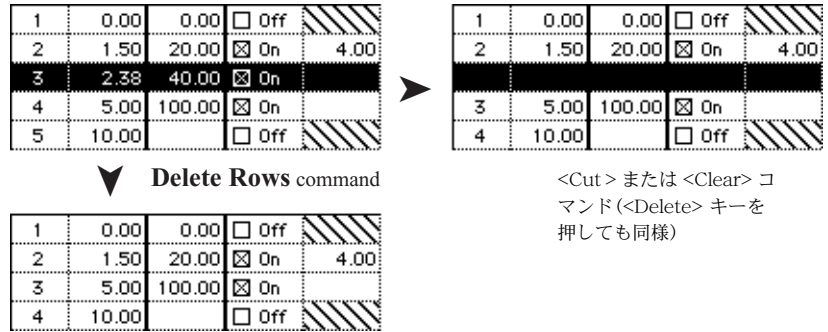
総ての行を選択するには Edit メニューの < Select All > を選択します (図 A-2, 148 ページ)。Edit メニューから選択データの削除や消去、ペースト、コピーができます。

Edit メニューの < Cut > もしくは < Clear > は行自体では無くデータに影響し、空白行のままになります。データの削除には < Delete > キーも使えます。行を選択すると Edit メニューの関連コマンドが使用できます:

- ・ < Delete Rows > を選択すると、選択した行がデータごと消去します。

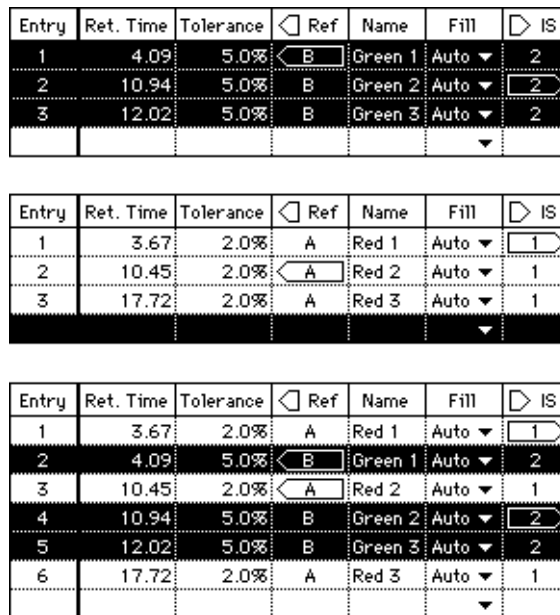
< Insert Row > を使うと、選択した行の上に新しい行を追加します。

図 3-20
 行の削除と消去との違い



<Cut>または<Clear>コマンド(<Delete>キーを押しても同様)

図 3-21
 行を張り付けて二つのキャリブレーションテーブルを一つにする



キャリブレーションテーブルの行をドラッグし選択してコピーする。

キャリブレーションテーブルの下の空白行を選択する。

コピーした行を貼り付ける。張り付けた行は自動的に並び替わりますが、反転表示のままです。

消去したりコピーした行は同種の表に張る付けることができます。異種の表からコピーしたデータがそのまま張り付けできない場合には、可能なデータだけを貼り付けます。例えば、データドキュメントのピークレポートウィンドウから選択行を、キャリブレーションテーブルウィンドウのテーブルビューに貼り付けができます。時間データを伴う行を表中に貼り付けると、時間順に表示し再番号付けされます。キャリブレーションテーブルはリテンションタイム順に、メソッドテーブルはインジェクションタイム順に分類されます。

新しい行を貼り付けずに表中の行データを選択すると、それまでのデータは置き換わります。選択した行データは、別の表計算ソフトやワープロソフトにもタブ切り行として貼り付けできます。

表記行にデータを入力

データの入力は他の表計算ソフトと同じ要領で行います。データの変更ができるセルではポインタが十字型になり、クリックすると文字が入力できます (図 3-19)。セルによっては入力できる文字が限られる場合があります。

Effie
965
####
####

Effie
965
11360
11032

文字の入力が終わったら <Enter> キーを押して下さい。カーソルの形が元に戻ります。表示は表記段落の設定 (小数点以下の桁数、%表示など) 通りに表示します。入力した文字数が表記段落の幅より多い場合にはシャープマーク (#) が出ます。これは段落の幅を広げると通常通りの表示に戻ります。時間を変更すると、表中の順番が時間順に並び変わります。PowerChrom では時間は小数点表記にも、時分秒の形式にも指定できます。入力した文字数がセルの幅より多い場合にはシャープマーク ### が出ます。これはセルの幅を広げると通常通りの表示に戻ります 図 3-14, 36 ページ。

表中の移動は下記の操作に従います：

- ・ タブキーで右側のコラムに移動します。
- ・ < Shift + Tab > で左側の前のコラムに戻ります。

図 3-22

テーブルに新しい時間を入力した後に、初期値が挿入されるセルがあります

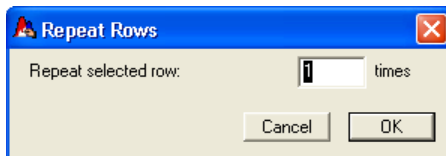
6	17.72	2.0%	A	Red 3	Auto	1	Linear Through Origin	<input checked="" type="checkbox"/> Yes
	18.9							

▼ 編集が終了

6	17.72	2.0%	A	Red 3	Auto	1	Linear Through Origin	<input checked="" type="checkbox"/> Yes
7	18.90	2.0%	A		Auto	1	Linear Through Origin	<input checked="" type="checkbox"/> Yes

図 3-23

Repeat Rows ダイアログボックス



997	Unknown
998	Unknown
999	Unknown
###_###	Blank
###_###	Blank

最大登録ラン数は 999 です

・ エンタキー (Macintosh ではリターンキー)、か下向き矢印キーでその下の行に移動します (同じ列の)。

・ < Shift + Enter > (Macintosh では < Shift - Return >) か、上向き矢印キーでその上の前の行に戻ります (同じ列の)。

Edit	
Undo	Ctrl+Z
Cut	Ctrl+X
Copy	Ctrl+C
Paste	Ctrl+V
Clear	
Select All	Ctrl+A
Show Clipboard	
Copy Special...	
Export Peaks	
Delete Rows	Ctrl+K
Insert Rows	Ctrl+I
Repeat Rows...	
Collapse Rows	
Expand Rows	
Preferences	▶

空白行に数値を入力して編集を終了したら、その行のすぐ上の行からできる限りの情報を空白行の残りのセルにコピーします。

シーケンスドキュメントを開いているときには Edit メニューに <Repeat Rows... > が表示します。このコマンドはサンプルテーブルの表記段落を指定していない時には使用できないようになっています。一連の測定を繰り返す時にこのコマンドを利用すると便利です。< Repeat Rows... > を選択すると、Repeat Rows ダイアログボックスが表示します (図 3-23)。ダイアログボックスには選択した行数が出ます。選択した行の測定を繰り返す回数を入力して下さい。行は 999 行までテーブルに表示可能ですが、繰り返す回数は選択した行数によって違ってきます。もしも 999 行を超えてしまった場合は、空白行にシャープマーク (###) が出ます。このように表示した場合は測定は行われませんのでご注意ください。

サンプルテーブルをアクティブにしている場合は、Edit メニューに下記のコマンドが追加します。(図 A-2, 148 ページ):

・ < Collapse Rows > を使うと隣り合っている複数のランをまとめて圧縮表示します。

・ < Expand Rows > では逆に拡張して各ランごとに表示します。

The effect of these is shown in 図 3-23. にはその効果が現れています。圧縮段落 (Runs 列の範囲で) は 100 行までで、セルを修正する

図 3-24

サンプルテーブルの隣り合う段落の拡張、圧縮の例

Runs	Name	Vol	Rpts	Method	Action
1	Blank	2.5	1	Method 1 ▼	Data ▼
2-4	Standard	2.5	3	Method 2 ▼	Calib ▼
5	Blank	2.5	1	Method 1 ▼	Data ▼
6-9	Unknown	2.5	4	Method 2 ▼	Data ▼
10	Blank	2.5	1	Method 1 ▼	Data ▼

段落の拡大



段落の圧縮



Runs	Name	Vol	Rpts	Method	Action
1	Blank	2.5	1	Method 1 ▼	Data ▼
2	Standard	2.5	1	Method 2 ▼	Calib ▼
3	Standard	2.5	1	Method 2 ▼	Calib ▼
4	Standard	2.5	1	Method 2 ▼	Calib ▼
5	Blank	2.5	1	Method 1 ▼	Data ▼
6	Unknown	2.5	1	Method 2 ▼	Data ▼
7	Unknown	2.5	1	Method 2 ▼	Data ▼
8	Unknown	2.5	1	Method 2 ▼	Data ▼
9	Unknown	2.5	1	Method 2 ▼	Data ▼
10	Blank	2.5	1	Method 1 ▼	Data ▼

と一行分だけが変わったように見えますが、実際は圧縮した行の全てが変更されています。

単位について

クロマトグラムの時間軸は2種類の表示方法があります。時間は小数点を含む分表示、または時:分:秒の形式で表示します。設定は Options ダイアログボックス (図 7-1, 138 ページ) (Edit メニューの Preferences サブメニューの <Options...> で開くことができます) で行います。表示はいつでも変更できます。

通常の測定では使用している単位について注意する必要はありません。プログラムでは全ての計算を一貫して処理します。絶対値はクロマトグラフィーを定量化する解析には必修です。データランで同定したピークをキャリブレーションで入力値 (濃度や重量などの) に基づいて解析値を算出します。キャリブレーションは内部標準法も外部標準法でも、入力値に基づき解析できます。測定単位や表示を変更したい場合があります (別のソースのデータと比較する場合など) ので、本プログラムではこのような場合に利用できる単位に関する使いやすしい機能がたくさん付いています。

クロマトグラムの振幅軸の単位はスケールポップアップメニューまたは Axis Labels & Scales ダイアログボックス 図 3-3, 29 ページで行います:

- ・ **パーセント表示**: Hardware Settings ダイアログボックスで設定した検出器の電圧を 100% として、振幅を百分率で表します。プラス表示のみになり、単位は %fs で表示します 図 4-3, 53 ページ。
- ・ **電圧表示**: 検出器より出力した電圧単位の表示です。フルスケールは Hardware Settings ダイアログボックスで設定した数になります。単位は V または mV で表示します 図 4-3, 53 ページ。
- ・ **単位の変換**: Unit Conversion ダイアログボックスで設定した単位を使用することができます 44 ページ。単位を設定しない場合は電圧で表示します。この表示方法が初期設定になっています。

Peak Report ウィンドウ 図 6-16, 123 ページ でも単位を表示に使用します。ピークハイト (高さ) は振幅軸の単位で、ピークエリア (面積) はそれと秒を乗じた単位です。これらの表記単位は解析に使用する単位には影響しません。



ユニットコンバージョン（単位変換）

ユニットコンバージョン機能を利用するとスケールの調整や単位の変更ができるので、どのような波形でも任意の単位で表示することができます。ユニットコンバージョン機能は2つのパートに分かれています。一つは新しい単位の設定、もう一つは古い表示と新しい単位との関係の定義です。単位変更はラン毎に行うことも、データドキュメント中の総てのランに対して行うことも可能です。マニュアルランの前にはこの機能は使用できないので注意して下さい。その場合はメソッドで単位変換ができますので、メソッドを使って求めた値が必要とする単位に対応します。単位変換はチャンネル毎に設定して下さい。

Unit Conversion ダイアログボックス [図 3-23](#) を呼び出すにはクロマトグラムのスケールポップアップで < Unit Conversion... > を選ぶか [図 2-11, 17 ページ](#)）、Data メニューで < Unit Conversion... > [図 A-5, 150 ページ](#) を選択して下さい。

大部分のクロマトグラムの測定では単位変換は必要ありませんが、以下の場合に便利です：

- ・ 真の物理的な単位でシグナルを表示したい。例えば、電気化学検出器でのナノアンペア、伝導度計でのマイクロシーメンス UV デテクターでは吸光度単位といった場合です。
- ・ 検出器感度をランによって変える場合。標準液の濃度とサンプル濃度が大きく異なる場合には、振幅軸のスケールを変える必要があります。この場合はキャリブレーションランとデータランとで単位の登録に注意して下さい ([47 ページ](#))。

単位のネーミング

Unit ポップアップメニュー で単位名の登録、削除をします ([図 3-23](#))。

単位を変換する

ダイアログボックス [図 3-23](#) で左側 2 つのボックスは実測値用の入力欄で、右側にはそれに対応する変換値を入力します。4 つの全てのボックスに数値を入力することと、上下二組の値からその相関（比例関係を示す）が演算できる組み合わせにすることに注意してください。

データディスプレイエリアのデータをクリックすると、そのクリックした箇所をアクティブポイントとした縦線が出て、ディスプレイエリ

図 3-25
Unit Conversion ダイアログボックス

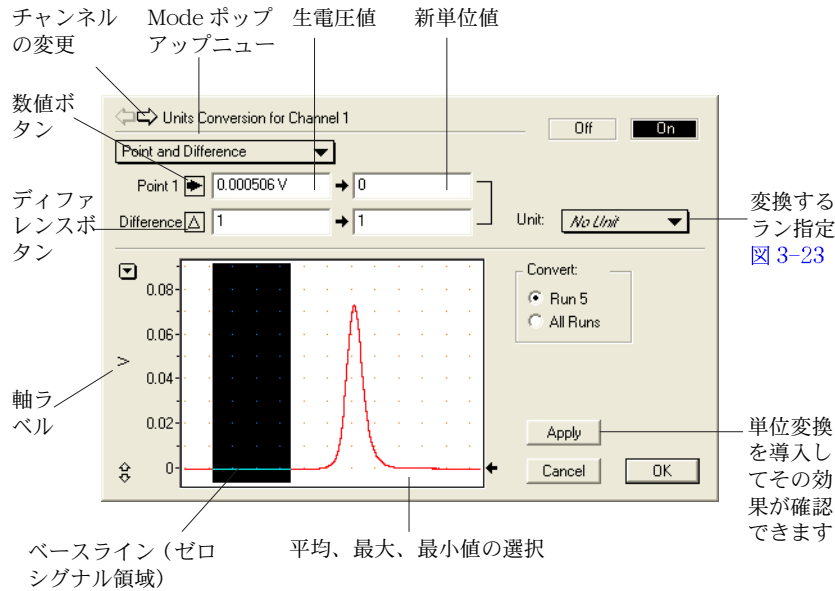
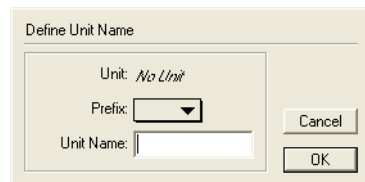




図 3-26
単位設定ダイアログボックス



アの右側に波形とアクティブポイントを示す縦線とがぶつかるポイントを示す矢印インジケータ  が表われます：

- ・ 選択範囲のシグナルの平均振幅値（まずシグナル表示の領域をドラッグして選択します）か、
- ・ シングルポイント値（シグナル表示の領域で必要とするポイント上をクリックします）

Difference ボタン  をクリックして選択範囲の最大値最小値の差を入力します（まずシグナル表示の領域をドラッグして選択します）。

[図 3-23](#) では、単位変換で検出器シグナルのベースラインを設定方法を示します：ゼロシグナル（ベースライン）の領域を選択し、Value ボタンを使ってその領域の平均値を入力します。モードポップアップメニューの < Point and Difference > を使って、ベースラインシグナルのスケール比を 1:1 にします。これでシグナルはベースラインで

オフセットされます。ピークの高さや面積計算には個々のピークのベースラインを使いますので、ここでのベースラインは解析には直接は影響ありません (75 ページ)。

モードポップアップメニューの選択により、上側のボックスにはポイントボタン、下側のボックスにはポイントボタンまたはスロープボタンのどちらかが表示します。

ダイアログボックス右上の On、Off ボタンでも単位変換を行う、行わないの切り替えができます。この時に設定した単位は消去できません。

単位変換と分析

前にも述べましたがメソッド (72 ページ) とキャリブレーション (61 ページ) ではそれぞれ独自の単位を持っていて、それらの単位が解析や反応の平均などに使用されます。

検出器の単位を設定する場合には、下記のこと留意して下さい。

- ・キャリブレーションをピーク面積か、高さかのどちらで行うのかを指定して下さい。キャリブレーションを比率で行う場合はランの単位に関わらず単位は適用されず、そのキャリブレーションを全てのランの解析に使用できます。

解析時のメソッドでは同じ単位か百分率スケールを使う (百分率スケールの場合はどの単位でも使えます)。

4

CHAPTER FOUR

セットアップ

この章では基本的なハードウェアの設定や、インジェクションオプションの設定方法を説明します。

さらに、プログラム中で使用する各テーブルの設定方法と相互関係についても説明します。最初は理解しにくい部分もあるかも知れませんが、プログラムに慣れていくに従ってこれらを理解することの重要性がお判りいただけます。

データを記録するための設定

クロマトグラムをマニュアルサンプリング、もしくはメソッドランを使って記録する場合には、次の三つのパラメータの設定が必要です：

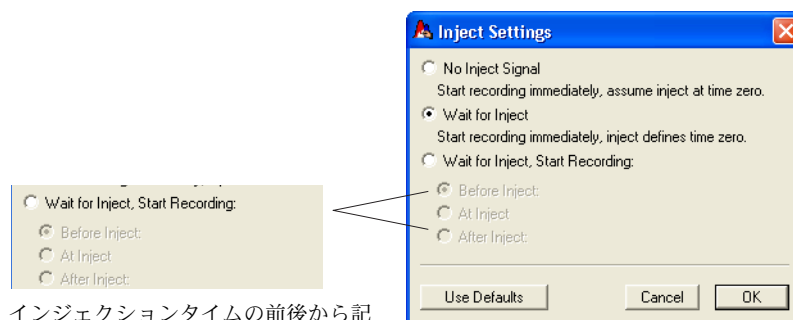
1. 記録時間：Manual Sampling ダイアログボックスで設定するか
図 2-9, 15 ページ、前回のメソッドドキュメントの設定を使います
71 ページ：
2. インジェクションシグナルの取り扱い方：Manual Sampling ダイアログボックスの < Inject Settings > 図 2-9, 15 ページか、メソッドドキュメントの Method メニューから < Inject Setting > コマンド 図 A-10, 151 ページで指定します。
3. ハードウェアのサンプリング速度とフィルター設定は、Manual Sampling ダイアログボックスの < Hardware Settings > ボタンか、メソッドドキュメントの Method メニューから < Hardware Settings > コマンドを使います。

データドキュメントのマニュアルサンプリングの設定は、そのドキュメントで最後に使ったものになります。

インジェクトセッティング

クロマトグラムウインドウの時間軸はカラムに試料をインジェクトしてからの経過時間で表示します。しかし、データを記録する時間はサンプルインジェクションとは別に設定することができます。設定は、Method メニューから < Inject Settings... > を選択するか、Manual Sampling ダイアログボックスの < Inject Settings... > ボタンをクリックして下さい。Inject Settings ダイアログボックス 図 4-1 が表示します。

図 4-1
Injection Setting ダイア
ログボックス



インジェクションタイムの前後から記録するオプションを選ぶと、記録開始時間を入力する必要があります

No Inject Signal : このオプションを選択すると、プログラムは記録開始時をインジェクション時とみなします（後で触れますが変更は簡単にできます）。

Wait for Inject : このオプションではインジェクションシグナルの発生時をゼロ時間とみなします。ランの開始時のゼロ時間が変わり、インジェクションシグナル発生時がゼロ時間となります。

'Wait for Inject, Start Recording : このオプションを選択すると、記録を開始するタイミングを 3 つの中から選ぶことになります :

- ・ **At Inject** : インジェクションシグナルが入る前のデータは無効となり、インジェクション時がゼロとしてクロマトグラムの記録を開始します。
- ・ **Before Inject** : 10,080 分（1 週間）までの時間が入力できます。サンプルをインジェクトする前のシグナルの安定さやベースラインの様子が見られます。カラムの状態やインジェクション前のデータが保存できます。
- ・ **After Inject** : 10,080 分（1 週間）までの時間が入力できます。設定時間までのデータは消去され、クロマトグラムはゼロ点以後から記録が始まります。ラン時間が長く必要なピークだけを残してランを終了したい場合に有効です。

< Wait for Inject >、< Wait for Inject, Start Recording Before Inject > を選択するとインジェクション前の時間は負の表示になります。

詳細は [インジェクションタイムの設定](#) , 122 ページを参考。

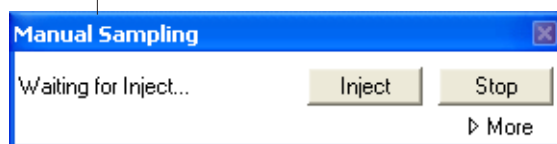
サンプリングステータス

サンプリング時は常時ステータスパネルミニウインドウ [図 4-2](#) が表示されており、クロマトグラムの記録の進行状態が判ります。


< No Inject Signal > [図 4-1](#) が選択されていれば直ぐに記録を開始し、ステータスパネルには 'Running' と表示します。記録時間を設定した場合は時間経過を示すプログレスバーも表示します。

ランの作動様式

図 4-2
サンプリング中で記録しない時の Status Panel



それ以外のオプションでは、インジェクションシグナルの発生までステータスパネルには 'Waiting for Inject' と表示されます：



- ・インジェクションシグナルを受けるか
- ・インジェクトボタンをクリックするか、キーボードショートカットで <Ctrl+J> (Macintosh では -J) を入力

インジェクションシグナル待ちの状態ではランが始まるとピープ音で知らせてくれます。

インジェクションシグナルの発生以降に記録を開始する設定では、それ以前のデータは失われますので、その確認の為にステータスパネルに 'Not Recording' の表示が出ます。この表示が出ている間に取り込まれたデータは、インジェクションシグナルの発生時には消去します ([図 4-1, 50 ページ](#))。この表示はインジェクション信号が入り記録が始まると消えます。

ランの終了時までインジェクションシグナルの発生がない場合は、それまでに記録したデータは全て保存されます。データが必要なければそのランを消去するか ([98 ページ](#))、手動でインジェクションタイムを設定します ([122 ページ](#))。

ハードウェアの設定

クロマトグラムを正確に測定するには適切なハードウェアの設定をする必要があります。機器の接続はハードウェアのマニュアルに基づいて行って下さい。詳細設定についてはメソッドランの時は Method メニューから <Hardware Settings...> を選択、マニュアルサンプリングの時は Manual Sampling ダイアログボックス内の <Hardware Settings> をクリックして下さい。Hardware Settings ダイアログボックス ([図 4-3](#)) が表示します。初期設定ではダイアログボックスの左側に Sampling  と Pumps  のアイコンが表示します。

サンプリングの設定

ハードウェアは検出器からのアナログデータを随時デジタルデータに変換していきます。サンプリングスピード (一定時間内のサンプリング数) は <Sampling Speed> の項にあるボタンをクリックし、サンプリングスピードポップアップメニューを引き出して下さい [図 4-3](#)。サンプル数は最低 12 サンプル / 分から最高 100 サンプル / 秒までありますので適正なサンプル数を選んでクリックして下さい。大抵のピークは 100 サンプル程度で十分正確に表示できますので、10 サン

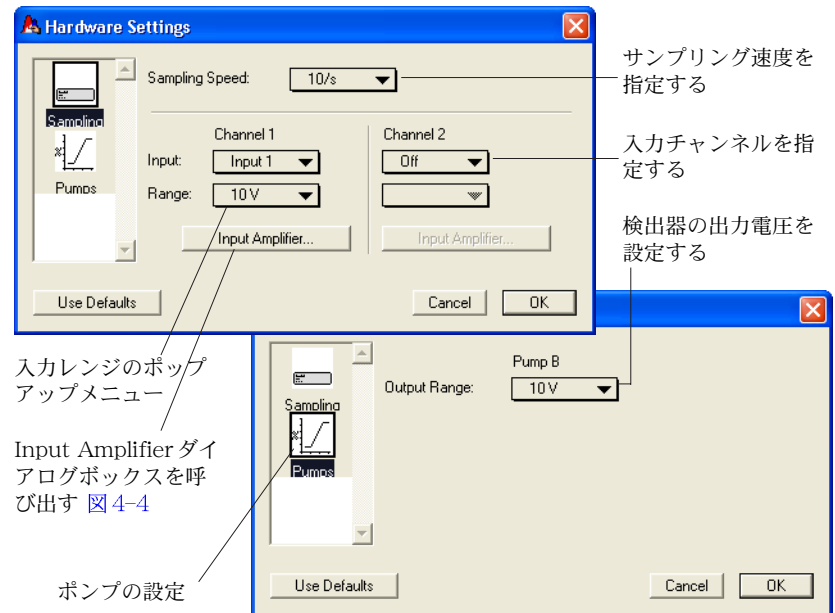
プル / 秒の測定で十分かと思われます。2 チャンネル測定の場合のサンプリングスピードは両チャンネルとも同一になります。

それぞれの検出器のチャンネルには入力レンジ、フィルター処理などの設定項目があり、Input と Range ポップアップメニュー、<Input Amplifier...> で選択します。初期設定は Channel 1 は入力チャンネルとして Input 1、入力レンジが 1 volt(入力幅が -1V ~ +1V) です。図 4-3 の様に Channel 2 を <Off> にするとそのチャンネルはダイム表示で使用不可になります。

ハードウェアで測定する入力電圧値は検出器からの出力電圧値です。予想される検出器からの最大出力電圧と設定出力電圧ができるだけ近い値になるように設定して下さい。最良の S/N 比が得られます。ピークのシグナルに比べて入力レンジの設定が大き過ぎる場合は、レンジの設定を下げて入力シグナルを増幅します。検出器の出力電圧が判からない場合は Input Amplifier ダイアログボックスで調整して下さい。

< Input Amplifier... > をクリックすると Input Amplifier ダイアログボックスが立ち上がりますので、各チャンネル毎に入力レンジの変


図 4-3
Hardware Setting のサンプリングパネル



更、シグナルのフィルター処理を設定します。また、実際に入力しているシグナルの確認ができます。

ポンプの設定



注：外部のポンプコントローラを使う場合は、ここでの初期設定の変更は必要はありません。

Output Range ポップアップメニュー  4-3 でポンプの出力レンジを設定して下さい。初期設定では 10V (0 V ~ +10 V) にセットしてあります。クロマトグラムではポンプのレベルを測定しているわけではありませんが、設定した数値は直接メソッドでの計算に使用しますので正しくセットする必要があります。メソッドを一時停止するとポンプのグラジエントレベルはそのままの状態になります。メソッドの一時停止状態を解除するとポンプのコントロール機能は復帰します。

ここでのポンプコントロールは溶離液中に流れるポンプ B の溶媒比 % の変化を示したものです ([デバイスコントロール](#), 74 ページ) 。従ってポンプシステムにアナログ電圧信号を制御する機能が付いている必要があります。この機能を持ってないポンプがありますので注意して下さい。

また、このポンプコントロールを使えば、外部のポンプコントロールで実際に制御されるグラジエントポンプがグラフィック表示できます。この場合は、外部のポンプコントロールで使用している設定をそのまま入力する必要があります。

インプットアンプリファイア

< Input Amplifie... > ボタン  4-4, を選び Input Amplifier ダイアログボックス  4-3 を呼び出し、ソフトウェアのコントロールとハードウェアで使用するフィルターの設定をします。入力しているシグナルが表示しますので設定の変更がディスプレイで確認できます。

シグナルの表示

ダイアログボックス左側にはそのチャンネルに入力している信号が表示します。ただし、インプットアンプリファイアの設定中は記録は行なわれません。速度の遅い信号は詳細に表示しますが、速度の速い信号は塗りつぶされた矩形の様に表示します。波形上部に信号の平均電圧が表示します。

振幅軸上部のポーズボタンをクリックすると、表示している波形を一時停止することができます。振幅軸上部のポーズボタンを押すとボタ

図 4-4
Input Amplifier ダイアログボックス

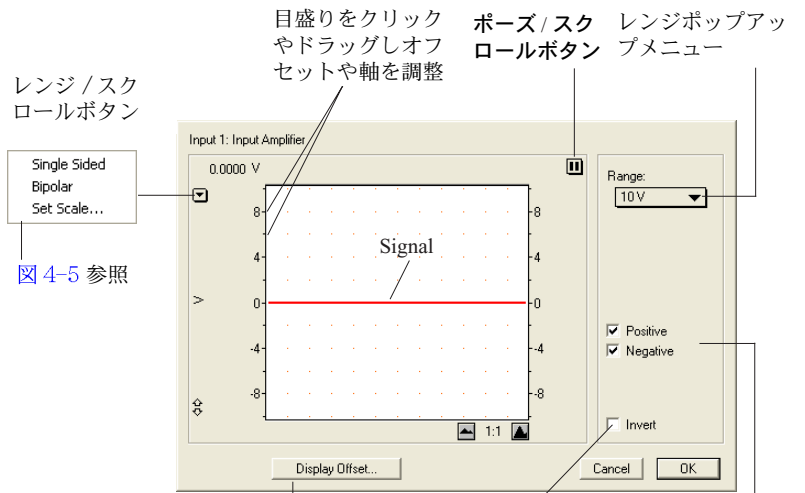


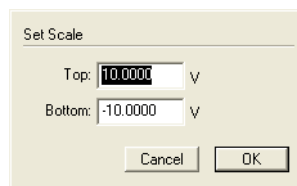
図 4-5 参照

図 4-6 参照

シグナルの極性を反転する

シグナル入力コントロール、e-corder 201 と 401 ユニットのみに

図 4-5
Set Scale ダイアログボックス



の表示が変わります。そのボタンをクリックすると再度波形の移動が始まります。

クロマトグラムの軸ラベルを変更しなければ、振幅軸の単位は常に V か mV 表示です。

Set Scale オプションは軸を詳細に設定するためのものです。< Set Scale... > を選択すると Scale Range ダイアログボックス 図 4-5 が表示されるので数値を入力して下さい。軸スケールの調整は Range ポップアップメニューでおおよその設定をした後に、< Set Scale > で詳細に調整することをお勧めします。

レンジの設定


Range ポップアップメニュー 図 4-4 ではチャンネルの入力レンジを設定します。ここでのレンジ設定は Hardware Settings ダイアログボックスの設定と同じです (図 4-3, 53 ページ)。通常は検出器から

の出力信号にマッチするレンジを選びます。しかし一連のラン測定で僅かなピークしか期待できない場合は、検出器からの最大出力信号の10～50%程度のレンジにした方が良いと思われます。

フィルターの設定

パワーchromは50Hzのローパスフィルターを持っています。ソフトウェアのこのデジタル信号処理のアルゴリズムで、電源ノイズなどのノイズは除去できます。サンプリングスピードが40サンプル/秒以上の記録をする時は、常にこのフィルターを使用することをお勧めします。詳細はPowerChromハードウェアのマニュアルを参照して下さい。



入力信号のコントロール

<Positive> と <Negative> コントロールボックス  4-4, allow you to set up three possible input modes:

で、入力端子やケーブルから入力する信号の極性をコントロールします。

- ・ <Positive> チェックボックスのみがチェックされている状態です。プラスの入力のみが使用され、プラスの信号はプラスの信号として表示します。
- ・ <Negative> チェックボックスのみがチェックされている状態です。マイナスの入力のみが使用され、プラスの信号はマイナスの信号として表示します。
- ・ <Differential> は <Positive> と <Negative> チェックボックスの両方がチェックされている状態です。プラス、マイナス両方の入力を使用し、表示するデータはプラス入力とマイナス入力の差になります。もしもプラスとマイナスの入力が同じである場合はデータは0として表示します。この設定がPowerChromハードウェアの初期設定になっています。

信号の極性を変更

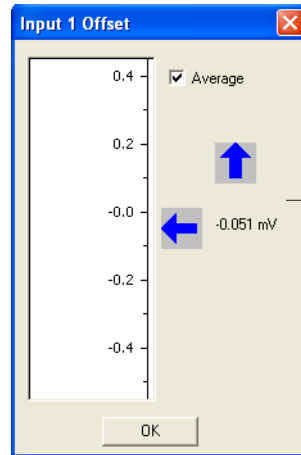
Invert チェックボックス  Invert  4-4, 55 ページ をチェックすると、入力信号の極性をつなぎ直すことなく変更できます。

例えば、ある物質の屈折率の測定でマイナスの信号が計測されたが、クロマトグラム中ではマイナスのピークは測定されないのでプラスの信号として表示したい時にこのボックスをクリックしプラスの入力信号として表示させます。

オフセット表示

ダイアログボックス左下の < Display Offset... > ボタン [図 4-4, 55 ページ](#) をクリックすると Input Voltage ダイアログボックス [図 4-6](#) が表示します。ここではチャンネルに入力している信号の電圧が表示します。検出器の調整をする時に使用すると便利です。この機能は、検出器とコンピュータが離れたところに置いてある時に調整しやすい様に、0V を示す矢印が表示します。これはただの電圧表示であり、ここでは調整できないので注意して下さい。

図 4-6
I シグナルのオフセットを表示



ディテクターのオフセット
コントローラ (有れば) で
シグナルのゼロ確認する

キャリブレーションドキュメント

標準液の各化合物のリテンションタイムはそれぞれの同定判定に、ピークの高さ又は面積で定量の演算に利用します。これらの情報はキャリブレーションドキュメントに収録されます。

キャリブレーションドキュメントは外部ファイルを分けたり、シーケンス、データドキュメント内に取り込むこともできます。

外部キャリブレーションドキュメントを作成するには：

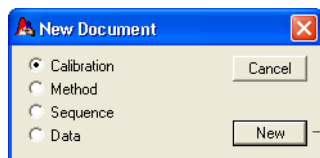
- ・ Easy Access ウィンドウ (図 2-3, 11 ページ) の < New Table > ボタンをクリックして New Table ダイアログボックス 図 4-7 を呼び出しすか：
- ・ File メニューから < New... > を選択し New Document ダイアログボックス 図 4-7 を呼び出して下さい。
- ・ または、既存のシーケンスかデータドキュメントからキャリブレーションドキュメントを取り出す 102 ページ。



Calibration

図 4-7

新規データドキュメントのダイアログボックス




ここをクリックして選択したウィンドウを呼び出し新規ドキュメントをつくる

既存のシーケンスやデータファイルに組み込まれた内部キャリブレーションドキュメントを作成したり、外部キャリブレーションを読み込む方法は、メソッドやキャリブレーションを管理する, 81 ページを参照して下さい。内部キャリブレーションは外部キャリブレーションと似ていますが、幾つか異なる部分があります。両者の違いはシーケンスとデータドキュメントの説明を参照して下さい。

キャリブレーションウィンドウ 図 4-8 は幾つかの部分に分かれています。二つのビューインフォメーション、表形式ウィンドウとレスポンスカーブが出ます。ウィンドウの左上に表示してあるビューボタンをクリックして必要な表示形式にして下さい。初期設定では左側のボタンが選択されている状態で、表形式の表示になっています：

- ・ ウィンドウの上部分はコメント枠で、キャリブレーションに使用した設定を表示します。ここで記載されている情報は変更することができませんが、別の場所で設定の変更をすると内容が設定

に合わせて自動的に変更します。Comments タイトルの下の部分には 32,000 文字のコメントが自由に入力できます。

・下の表部分はキャリブレーションの表データ 図 4-8、またはレスポンスカーブ (検量曲線) 図 4-13, 68 ページが表示します。ビューボタン  をクリックすると入れ替わります。表の段落はリサイズ、リネーム、表記順の変更、隠くすることが可能です。テーブルの表記設定, 36 ページ。

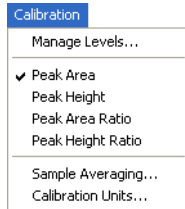


図 4-8
キャリブレーションドキュメントの Calibration Table 表形式ウィンドウ

キャリブレーションメニュー

キャリブレーションドキュメントを開くと、キャリブレーションメニューが出ます 図 A-9, 151 ページ。

ピークの面積、高さ (ハイト)、比率

Calibration メニューでは Peak Area、Peak Height、Peak Area Ratio、Peak Height Ratio の 4 種類の選択からピークを更正します。検出方法から選択できます。指定したコマンドにチェックマークが付きます。ピーク面積によるキャリブレーションが一般的に用いられている方法で、プログラムの初期設定にもなっています。ノイズが多いクロマトグラムや血液サンプルのように unknown ピークが多くピークが重なり合っているクロマトグラムではピークハイトによるキャリブレーションの方が適しています。

キャリブレーションテーブルのビューボタン
レスポンスカーブのビューボタン

Entry	tR (min)	tT (min)	Ref	Peak Name	Fill	IS	Response Function	In	Amount	Runs	A (V.s)
1	3.67	2.0%	A	Red 1	Auto	1	Linear Through Origin	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	1.00	1	40.96
2	4.09	5.0%	A	Green 1	Auto	2	Quadratic	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	1.00	1	51.18
3	10.45	2.0%	B	Red 2	Auto	2	Linear Through Origin	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	1.00	1	19.61
4	10.94	5.0%	B	Green 2	Auto	2	Point-to-Point	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	1.00	1	35.53
5	12.02	5.0%	B	Green 3	<input checked="" type="checkbox"/>	2	Linear	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	1.00	1	54.49
6	17.72	2.0%	B	Red 3	Auto	1	Linear Through Origin	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	1.00	1	62.07

コメントエリア
スプリットバー：ドラッグかダブルクリックでリサイズ
レベルポップアップ 図 4-26, 87 ページ

ピークインフォメーションエリア

スプリットバー：ドラッグかダブルクリックでリサイズ

レベルインフォメーションエリア

比率によるキャリブレーションでは内部標準が必要です。この方法では、インジェクション容量の変動やサンプル調整時のロスが補正できます。

サンプルの平均処理

シーケンスファイルはキャリブレーションランを収録し、既存のキャリブレーションドキュメントの入力を更新したり、既存のピーク面積/ハイトに上書きしたり、既存値と新測値とを平均処理します。

シーケンスでアベレージングオプション [88 ページ](#) を選び、Sample Averaging ダイアログボックスでアベレージング法を指定すると、それで更新します。

キャリブレーションラン用にシーケンスでアベレージングを指定すると、キャリブレーションドキュメントの Sample Averaging ダイアログボックスで設定したアベレージング法で更新します。このダイアログボックスは Calibration メニューから < Sample Averaging... > [図 4-9](#) を選ぶと表示します。

シーケンスにキャリブレーションランが含まれ、そのドキュメントが更新される場合は、サンプルアベレージングの変更はリテンションタイム、ピークエリア、ピークハイトに影響します：

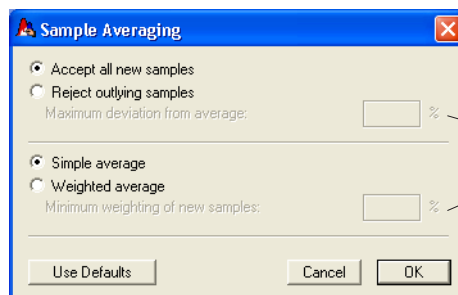
- ・ **Accept all new samples** : 総ての新サンプルで平均処理されません。
- ・ **Reject outlying samples** : 既定平均からズレたサンプルを除外して平均処理する。

新たなキャリブレーション情報の平均処理方法の設定は：

- ・ **Simple average** : 前の値と新規の値との和の平均を採ります。

図 4-9

Sample Averaging ダイアログボックス



二番目のオプションを選ぶと、このエントリーボックスが有効になります

・ **Weighted average.** 新サンプルを加重平均します。Weighted 20%は平均値の最低 20%は新規サンプルからの加重で、残りの 80%は従来からのもので平均処理します。これには少なくとも前に 4つの値が有るのを想定しており、そうではないと新サンプルの加重が相対的に過剰になってしまいます。

キャリブレーションの単位

キャリブレーションに用いる単位表示には二つの形式があります：

- ・ 一つは標準品を使った解析する量を表す単位で、濃度 (μM , ppm, ng/L, etc.)、重量 (ng, etc.)、モル濃度 (pmol etc.) などです。
- ・ もう一つは検出器からの出力の単位です。生データでは mV か V 表示です。

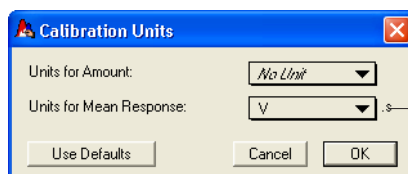
単位の設定には Calibration メニューから <Calibration Units...> を選び Calibration Units ダイアログボックスを呼び出します [図 4-10](#)。

<Amount> と <Mean Response> のメニューでは、Unit Conversion ダイアログボックスの Unit ポップアップメニューと同様に、単位名の指定、新単位の登録、削除ができます ([単位を変換する](#), 45 ページ)。

量単位は定量化のために入力し、Calibration Table ウィンドウの Level Information 項目の Amount 欄に表示します。この単位としては濃度や重さなど任意の単位が使えます。


Mean Resonse に使う単位は、検出器からの定量値に相当し、キャリブレーションテーブルウィンドウの Level Information 項目の Mean Response 欄に表示します。Ratio(百分率)でキャリブレーションする場合は、検出器のレスポンス値には単位が無いのでこのポップアップメニューは使用できません。キャリブレーションで設定した Mean Response の単位は、そのキャリブレーションで解析するランにも使います。従って、この単位が一致していないと解析値に誤りが生じます。

図 4-10
Sample Averaging ダイア
ログボックス



これはピーク面積のキャリブレーションで単位は秒との積です

キャリブレーションテーブルビュー

ウインドウテーブルビュー ( ボタンをクリック) の下段はキャリブレーションの表形式ウィンドウ [図 4-8](#) で、指定した全ピークの情報
をピークインフォメーションに表示します。新たなデータは直接入力するか、データドキュメントの Peak Report ウィンドウからデータ表記行にペーストします。

各段落の表題の幅は大、中、小に変更できます [37 ページ](#)。表記段落については後で詳しく説明します。

各コラムの内容を次に説明します。表題は太線内に表示します (表題は初めから設定されており変更出来ません)。表題の大中小の幅は Format Columns ダイアログボックスで変更できます, [図 3-17, 37 ページ](#)。

Entry
1
2

エントリー番号 (Entry Number, Entry, #) 左端のコラムは Entry 項目だけで修正は出来ません。キャリブレーションテーブルのこの行はリテンションタイムの速い順に記載されます。

ピークインフォメーション

ピークインフォメーションの段落にはキャリブレーションピークの同定、特性、ディスプレイセッティングなどの項目があります。

リテンションタイム (Retention Time, Ret.Time, tR)

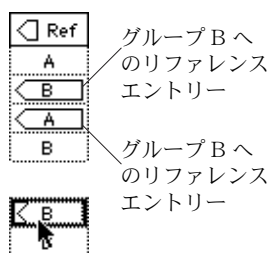
このコラムはインジェクションタイムからピークの最大振幅値を示すポイント迄の時間を表わします。リテンションタイムで化合物を同定し、それに基づいてその行にデータを記録します。


リテンションタイム幅 (Retention Tolerance, Tolerance, t_T)

トレランスはリテンションタイムのズレの許容度を示し、その範囲内であれば同定されます。百分率 (5% 等の) か絶対時間 (H:M:S か分単位で) を入力します。時間フォーマットするか、プログラムプリファレンスで選んだ形式で入力します。

リファレンスグループ (Reference Group, Reference, Ref)

類似するリテンションの性質を持つ化合物は同じリファレンスグループとしてグループ登録できます。その欄に一文字 (A, B, C...) か、一文字に番号を付けて (A1, A2, A3 ...) 入力します。文字は大文字です。




リテンションタイムの同定が簡単な化合物は、一つのリファレンスグループとして登録し、その表題の上からマーカー  をダブルクリックして設定します。リファレンスピークのセルをダブルクリックすると、マーカーの有無が切り換わります。リファレンスピークは比較的大きなピークを対象とし、解析結果も良好となります。

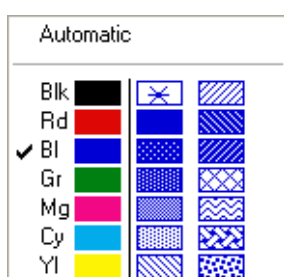
クロマトグラフィーのカラムは経時変化していますので、同じグループのリテンションタイムを基準ピークとして調整し補正します。これにはそのグループのリファレンスエントリーを変更します。キャリブレーションランだけがキャリブレーションテーブルを更新しますので、あるデータランがそれ以降のデータランの分析に影響を与えるものではありません（詳細は Appendix C を参照して下さい）。

ピーク名前 (Peak Name, Name)

この項目には各ピークに対応する化合物の名称を入力します。標準試料によってデータランで同定するピークに、この名称を使います。


フィルパターン (Fill Pattern, Fill)

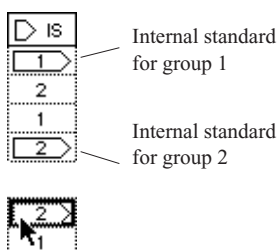
クロマトグラムに表示するピークの塗りつぶしカラーと、模様を指定します。Colour & Pattern ポップアップメニューから選択します。Automatic にすると、Peak Display ダイアログボックス  3-5, 31 ページで指定する二種類の模様で交互にピークを色表示します。



内部標準グループ (Internal Standard, Int Std, IS)

同じディテクターレスポンスの性質を持つ化合物は一つのグループとして登録でき、1、2、3の数字で登録します。内部標準が一つの場合はこの項目欄は全部同じ数値にします。

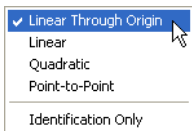
綺麗に分離するピークの化合物をそのグループの内部標準として指定する場合は、その表題の上からマーカー  をドラッグするか、該当欄をダブルクリックします。セルのダブルクリックでマーカーの有無が切り換わります。内部標準として使うピークは鮮明で、解析しているピークと同等もしくはそれ以上のピークを対象とすれば、解析結果も良好となります。



一般には（必修ではありませんが）、同じ内部標準を用いて全てのピークに同じディテクターレスポンス機能を使います。詳細は [定量計算](#), 166 ページを参照下さい。

レスポンス関数 (Response Function, Function)

検出器の応答機能や係数 (C, Bx, Ax², R², SSE)、など検出器の応答に関するコラムは個々のピークに使います。



検量線のレスポンス関数は通常キャリブレーションドキュメントで Response Curve を見ながら選びます。選んだ関数が検体量に対する エリア（またはハイト、レシオ）に適合しているかをグラフから判断 します [図 4-13, 68 ページ](#)。

1 種類の標準液量（又は濃度）しか使わない場合は、' Linear Through Origin ' を使います。

' Identification Only ' はピーク名で区分するだけで、実際はキャリブレーションには使われません。

内部標準の表記行はレスポンス機能を持ちません。これは内部標準は他のピークのピークハイト比率やピークエリア比率を決定するのに使われるだけで、これらの比率が個々のレスポンスカーブになるからです。

Correlation Coefficient (R^2)

相関係数 (Correlation Coefficient) は検量線とデータポイントとの一致度を示す係数です。1 で完全一致です。

SSE (SSE)

誤差の二乗の合計は検量線からのデータポイントの偏差を表し、ゼロで偏差無しを意味します。

Constant Term (C)

直線に適合する数式は $Bx + C$ で表されます。ここで C は検量線の原点からのオフセット (定数) です。

Linear Term (Bx)

直線フィットに定数 (C) を使って原点からのオフセットとします。B が直線の勾配です (レスポンスカーブ: $Bx + C$)。

Quadratic Term (Ax^2)

二次曲線フィットは三つの係数 $Ax^2 + Bx + C$ を使って表します。検出器の反応が薄い濃度では直線性を示し、濃度が濃くなるにつれて反応が減衰する場合に有効です。このコラムには二次係数 A が出ます。

レベルインフォメーション

レベルは標準ピークを測定する濃度差の数に相当します。一連の標準液ではキャリブレーションテーブルウィンドウの Level Information 欄 [図 4-8, 59 ページ](#)に濃度レベル (点数) の違いを表します。

図 4-11
 キャリブレーションテーブルのピークに対応する濃度レベル

Peak Info

3	10.45	2.0%	A	Red 2
---	-------	------	---	-------

Levels Info

<input checked="" type="checkbox"/>	Yes	1.00	1	19.61
<input checked="" type="checkbox"/>	Yes	2.00	1	39.22
<input checked="" type="checkbox"/>	Yes	3.00	1	58.83
<input checked="" type="checkbox"/>	Yes	4.00	1	78.44

図 4-12
 マネージレベルダイアログボックス

ピークインフォメーション欄の各表記行にはそれに付帯する 1 つ以上の濃度レベルを持ち 図 4-11、Levels ポップアップメニュー 図 4-12 に組み込まれます。

新規に作成したキャリブレーションテーブルには、一つの濃度レベルを持つこととなります。多点校正検量線法で複数の濃度レベルを用いるには、キャリブレーションメニューから < Manage Levels... > を選ぶか (図 A-9, 151 ページ)、レベルポップアップメニュー 図 4-9 から選択します。どちらの場合も Manage Levels ダイアログボックス 図 4-12 が表示します。

< New > ボタンをクリックして新規レベルを作成し、スクロールリストに表示させて選択します。初期設定で濃度レベルは 1、2、3 の順に番号が入りますが、必要なら指定したレベル名で再登録できます。

スクロールリストで何も指定しないと < Duplicate > と < Discard > ボタンはグレイ表示となり使えません。該当するレベルをクリックすると、そのレベルが指定されます。複数のレベルを選ぶには該当部を Shift-クリックするか、< Ctrl-クリック > (Macintosh では -クリック) 個々に選択、非選択できます。

レベルインフォメーション欄のコラム [図 4-11](#) は、1つの濃度レベルでピークインフォメーションの全エントリーを表わします。

In Level (In Level, In)

キャリブレーションテーブルの全ピークが同じ濃度レベル番号を持ちます。これ以外の濃度レベルを必要とする標準ピークがあれば、そのセルをクリックしてこのチェックボックスをオフとし、この濃度レベルから外します。

In	Amt	Runs	A/IS
<input checked="" type="checkbox"/> Yes	2.00		81.92
<input type="checkbox"/> No			
<input checked="" type="checkbox"/> Yes	2.00	1	19.28
<input checked="" type="checkbox"/> Yes	2.00	1	39.22
Yes			

Internal Standard row

比率 (Peak Area Ratio か Peak Height Ratio) でキャリブレーションする場合は内部標準は一定量に決まっていますので、内部標準 (IS のマークを付ける) のコラム行にはチェックボックスは付きません。これはこのピークのエリア (またはハイト) を基準として、他の総てのピークをその比率で表すのに使うためです。

Amount (Amount, Amt)

Amount には試料中の各化合物の既知量を示します。このコラムに既知量 (または濃度) を入力して下さい。ここで入力した値の単位は、Calibration Units ダイアログボックス [図 4-10](#), [61 ページ](#) で設定した単位で表されます。

Runs (Runs)

ランはキャリブレーションランの数を示します。検量線の決定には、通常 1 濃度当たり 1 度のランだけですが、誤差を避ける為には複数回のランの平均値を登録します。シーケンスを使えば表にラン数を加えれば、その回数の平均が自動的に採れます。マニュアルの場合は、作成されたデッドキュメントのサンプルテーブルを使って繰り返したランを規定します。

新たなキャリブレーションドキュメントをシーケンスやデータドキュメントに含めるつもりなら、これらのセルはゼロにして下さい。ランが収録されるにつれて増えてきます。

Mean Response ($\overline{\text{Mean Area}}$, $\overline{\text{Area}}$, \overline{A} ; $\overline{\text{Mean Height}}$, $\overline{\text{Height}}$, \overline{H} ; $\overline{\text{Mean Area Ratio}}$, $\overline{\text{Area Ratio}}$, $\overline{A/IS}$; $\overline{\text{Mean Height Ratio}}$, $\overline{\text{Height Ratio}}$, $\overline{H/IS}$)

このコラムタイトルは、Calibration メニュー [59 ページ](#) で選んだレスポンスの形式に依って異なります。Amount 欄に載る既知量の化合物に対応するピークエリア (又は高さ) またはその比率を表わし、Runs 欄が示すラン回数による平均値になります。表示するタイトル名はセルの幅によります。シーケンスはこの表を随時更新し、ピーク



エリアとピークハイトを算出します。数値はキャリブレーションメニューがアクティブの時だけ直接入力できます。

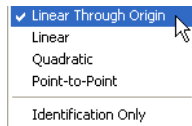
新たなキャリブレーションドキュメントをシーケンスやデータドキュメントに含めるつもりなら、これらのセルは空欄にして下さい。ランが解析され、レスポンスが決定されれば値が入ります。

段落の修正－特殊機能

本プログラムにはテーブル（表形式）の標準機能（[テーブルの表記設定, 36 ページ](#)を参照）に加えて、キャリブレーションテーブルの表記行には幾つかの特殊機能が付いています。各行にはピーク情報に加えて、複数の濃度レベルの情報（[図 4-11](#) 及び [図 4-12, 65 ページ](#)）が含まれています。あるキャリブレーションテーブルから 1 行分をコピーし、別のレベル登録名が異なるキャリブレーションテーブルにペーストすると、異なるレベル名の行が含まれているとの警告メッセージが出ます。レベルは名称に係わらず順番（番号順）にペーストされます。ペーストした行のレベル数よりもテーブル内の既存レベル数の方が少ない場合は、余分のレベルに対応するデータは表示しません。ペーストした行のレベル数よりもテーブル内のレベル数が多い場合には、そのエントリーに対応するレベルは空欄のままになります。

レスポンスカーブ（検量線）を見る

ビューレスポンボタン , [図 4-8, 59 ページ](#)をクリックすると、キャリブレーションドキュメントのレスポンスカーブビュー [図 4-13](#)の画面が出ます。このグラフは異なる標準ピークに対するの検量線を表します。ビューテーブルボタン  をクリックすると元の画面に戻ります。



ここの濃度レベル情報はテーブルビュー [図 4-8, 59 ページ](#)のものと同じですが、一つのピークに対して総ての濃度レベル（一つの濃度レベルに対する全ピークではなく）をも表示させることができます。

このウィンドウでレスポンスカーブの形式を（Response Function か、Function コラムから）選んで下さい。選択した結果や外れたキャリブレーションポイントが確認できます。

ピーク

レスポンスカーブウィンドウは、ピークポップアップメニュー

図 4-13

キャリブレーションドキュメントのキャリブレーションテーブル

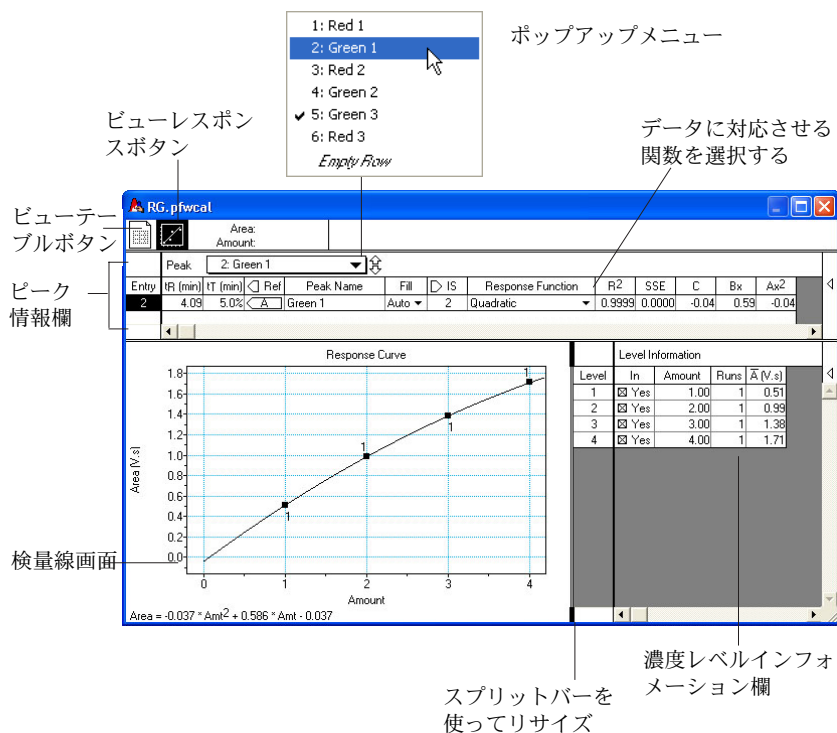


図 4-13 で指定した化合物を一度に一つのグラフに表示します。ピークポップアップメニューにキャリブレーションテーブル内の全化合物のエントリー番号、コロン及びピーク名が一覧表示します。ピークを選べばリストに挙がっているそのピーク情報を表示します。

レベルインフォメーション

レスポンスカーブビューのレベルインフォメーションの列欄 図 4-13 は表画面 図 4-8, 59 ページ のものとレベル名以外は同じですが、この画面では一つのピークに対し全濃度レベルが一覧できます。表画面 (テーブルビュー) では一つの濃度レベルに対して総てのピークが表示します。標準の表機能を持ち、段落の移動、リネーム、リサイズ、及び隠すことができます (テーブルの表記設定, 36 ページ)。

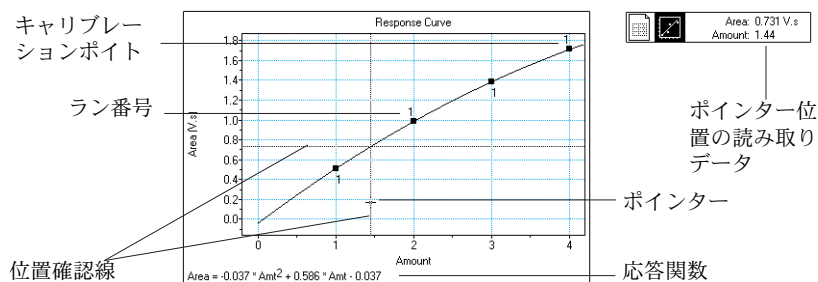
Level Name (Level Name, Level)

キャリブレーションドキュメントで規定したピークの濃度点数レベルを一覧表示します。

キャリブレーションドキュメントの各レベルの表記行はピーク毎に出ますが、そのレベルに関与しないピークの表記行は不履行表示になり

ます。ピークの Response Function [63 ページ](#)で ' Identification Only ' を選ぶと、総ての表記行が不履行表示となります。

図 4-14
Response Curve view の
検量線



レスポンスカーブ (検量線)

レスポンス関数の検量線 [図 4-14](#) は、そのレベル (濃度点数) に対応する点を黒の小さい■で示し、各点の横にラン番号が出ます。複数のランからこれらの点を平均して検量線は作成されます。

プログラムの Edit > Preferences > Options コマンドで ([138 ページ](#)) グラフの横軸の単位に対して、縦軸をピーク面積にするのか、ピークハイトにするのか、それぞれの比率にするのかを指定します。ポインターがグラフ上にある時は、ズームポインターに変わり (クロマトグラム of データエリアに有る時と同様に)、検量線上には縦横の破線との交点が出ます。その交点の読み取った値をウインドウの左上に表示します。

レベルインフォメーション欄のデータに対応させる検量線の関数形式を Response Function コラムから選択します。四種類の検量線様式 [63 ページ](#)と ' Identification Only ' のオプションがあります。レスポンスファンクションを変更すると、その変化が画面で確認できます。

' Identification Only ' (同定専用) か ' Point-to-Point ' (点渡り曲線) を選ぶとこの欄の全段落は不履行表示になります。' Identification Only ' ではピークはリテンションタイムで化合物を同定しますが、定量計算はしません。また、検量線で折り返し点を持つ場合は、関数式は表示しないで警告を出します。これは読み取り値が二つ推定される為、ピークが校正できずドキュメントの評定に誤差を生じる恐れがあるからです。

比率（百分率法）によるキャリブレーションでは内部標準に対する比率で各化合物の検出器の反応を決定します。内部標準は各ランで同じ量にしますので検量関数を持ちませんし、検量線も描画されません。このキャリブレーションモードでは検出器の反応は全化合物とも原点を通る直線になります。それ以外では警告が出ます。

別のレスポンス関数と組み合わせた数式を用いる場合は、その効果を疑問とする警告がキャリブレーションドキュメントの Verification（検証）機能 [92 ページ](#) が示すことがあります（それでもその関数を使うことはできます）。

Pint-to-Point は各プロット点を結ぶ点渡り曲線になりますので、どのデータにも適合します。最大 999 濃度水準まで対応しますので、極めて正確で幅広く対応します。

キャリブレーションドキュメントを使う

キャリブレーションドキュメントを作成しておけば、そこに含まれている情報はデータドキュメントを使ってピークを同定し定量化ができます。

キャリブレーションドキュメントでは：

- ・必要とする既存のデータファイルに取り込み、新しいキャリブレーションパラメータをロードできます（例えば、別個のランを使ってキャリブレーションパラメータを収集します）。
- ・シーケンスドキュメントに組み込んで使い、クロマトグラフィのカラムの経時変化による検出器の反応をアベレージング処理して更新すれば、より正確な分析ができます。

メソッドドキュメント

メソッドドキュメントではクロマトグラムの記録時間とピーク検出の調整、及びハードウェアの管理をします：

- ・クロマトグラムの記録時間を設定（必修）
- ・ハードウェアとインジェクションセッティングの設定（必修）
- ・外部装置を制御する一連のイベントタイムを作成（オプション）
- ・演算解析のパラメータ設定（オプション）

メソッドドキュメントは外部ファイルに分けて保存するか、シーケンスやデータドキュメントに組み込むことができます。

外部メソッドドキュメントを作成するには：

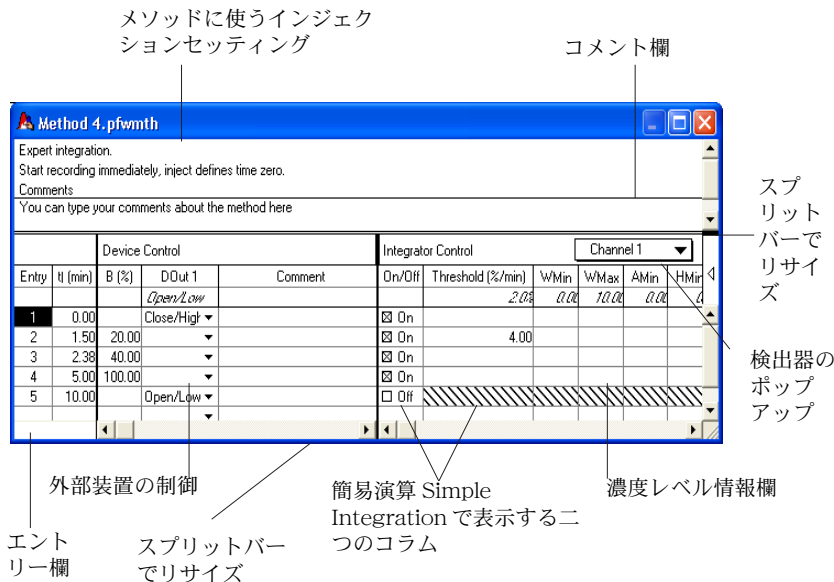
- ・ Easy Access ウィンドウ（[図 2-3, 11 ページ](#)）の <New Table> ボタンをクリックして New Table ダイアログボックス [図 4-7, 58 ページ](#) を呼び出します。
- ・ File メニュー [図 A-1, 148 ページ](#) から <New...> を選び、New Table ダイアログボックス [図 4-7, 58 ページ](#) を呼び出すか
- ・ 既存のシーケンスかデータドキュメントからメソッドドキュメントを取り出す（[102 ページ](#)）。

既存のシーケンスやデータファイル内に取り込まれたメソッドドキュメントを作成する方法（または外部メソッドを呼び出すには）は [メソッドやキャリブレーションを管理する, 81 ページ](#) のセクションを参照して下さい。取り込まれたメソッドは外部ドキュメントと類似していますが、シーケンスとデータドキュメントの項での説明の様に幾つか違いがあります。

メソッドドキュメントウィンドウ [図 4-15](#) は幾つかのエリアに分かれています：

- ・ コメント欄が上にあり、メソッドで使った記録のセッティングが表示します。このセッティングは直接には編集できませんが、Method メニューで振り付けたテーブルでの変更は反映されます。その下には 32,000 文字までのコメントが書き込めます。
- ・ コメント欄の下にそれに対応するメソッドテーブルが表示します。表中の列はリサイズ、リネーム、再配列、及び隠すことができます。詳細は [テーブルの表記設定, 36 ページ](#) を参照して下さい。

図 4-15
Method Table ウィンドウ



メソッドメニュー

Method メニュー 図 A-10, 151ページから < Hardware Settings... > と < Inject Settings... > コマンドでコンフィギュレーション用のダイアログボックスを呼び出します (データを記録するための設定, 50ページ)。

Simple 及び Expert Integration

メソッドメニューには < Simple Integration > と < Expert Integration > コマンドがあります。

< Simple Integration > を選ぶと、Integrator Control 項目の最初の2段だけが表示します 図 4-15。Expert Integration を選べば全オプション項目が表示し、より正確にピーク検出の管理ができます (インテグレートコントロール, 75 ページ)。

メソッドの単位

スレッショールドの演算や演算解析のパラメータに用いる単位をメソッドで設定します。単位の設定は < Method Units... > を選び、Method Units ダイアログボックスを呼び出します 図 4-16:

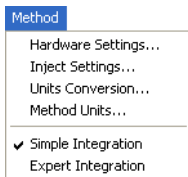
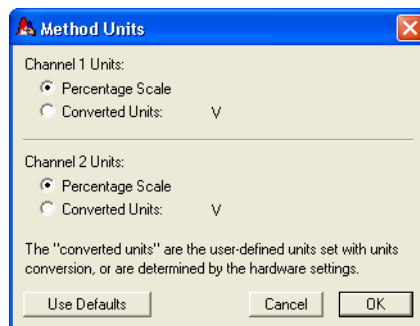
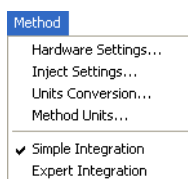


図 4-16
Method Units ダイアログ
ボックス



・ < Percentage Scale > を選ぶとハードウェアセッティングダイアログボックス 図 4-3, 53 ページで設定した入力レンジのフルスケールに対する百分率で振幅値を表します。これは無次元の %fs で表示されます。このオプションを選べば、ランにどのような単位を設定していても定量計算ができます。

・ < Converted Units > を選択すると、メソッド用に変換した単位か、又はハードウェアセッティングダイアログボックスで設定した検出器の出力電圧レンジがメソッド単位となります。このメソッド単位はランの解析に使うメソッドにも適用されますので、同じ単位を用いないと定量計算を誤ります。

単位変換

メソッドを使って作成するランは指定された単位でスケールしますので、単位変換はメソッドで設定します。Method メニューから <Units Conversion.> を選び Units Conversion ダイアログボックス 図 3-23, 42 ページを呼び出して単位を変換します。詳細は 44 ページ - 47 ページ を参照下さい。

メソッドテーブル

メソッドテーブル画面の下段は 図 4-15, 72 ページメソッドの表形式欄です。表記列の表題に対応し短、中、長の幅があります。表記列に単位を設定すると、幅が十分有れば表題の後にそれを表示します。

各表記列の内容は後で説明します。オフィシャルな表記列は太線で（長、中、短の表題順です）。表題は変更できます（Format Columns ダイアログボックスを使います 図 3-17, 37 ページ）。各段落の表題と、その下に表示してある各セルの初期設定値は変更できません。

メソッドテーブルでは空白セルに設定値を書き込みます。各段落の表題の下の 1 行目には初期設定値が斜字体で表示しています。この値は変更できません。初期設定を変更する場合はその下の 1 行目の空白行に変更する設定値を入力します。セルの表記を変更すると、以下の総てのセルが更新されます。

エントリー番号 (Entry Number, Entry, #)

インジェクションからの時間で分類され、早い時間の順にエントリー番号が付きます。このエントリー行は修正できません。

インジェクションからの時間 (Time from Inject, Time_i, t_i)

クロマトグラムの時間は全て、分析する試料がクロマトグラフフィーのカラム系にインジェクションしてから（ここをゼロ起点として）の経過時間を示します。このコラムはインジェクトタイムに対応する装置のコントロールや、インテグレータコントロールが動作する時間をリストアップし、テーブル内の該当行にその時間毎に分類して表記します。

必要に応じて（-）時間も入力でき、インジェクションタイム前のクロマトグラフィのカラムの安定を確かめることも可能です。-時間の行の演算パラメータは自動的に不履行表示となります。最終行はクロマトグラムの記録終了時間になります。メソッドを設定する際は必ずこの時間を入力する必要があります。

デバイスコントロール

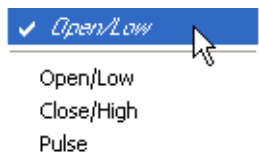
Device Control 欄で接続する装置のイベント時間の指定、2 液溶媒を使うグラジエントポンプの設定などを行います。管理する項目はハードウェアのオーナーズガイドを参考にして下さい。ポンプや外部装置は別のコントロールで制御している場合や、特に本装置のコントロール機能を使う必要が無い場合にはこの欄には何も入力する必要はありませんので、この段落は無視して結構です。

Pump B (Pump B Percentage, Pump B, B)

この段落はポンプ B (溶媒) の流量を示し、指定した時間内に設定値まで直線的に変化させます。流量の単位は%で、クロマトグラムのポンプ B のディスプレイ上に表示します。変動値は読み取れません。メソッドから直接算出します。既存の外部ポンプコントロール装置を使う場合には、それに使う値を入力してそのグラジエント設定値を記録します ([54 ページ](#))。

On/Off	Threshold
	2.0%

Default value



Output # (Digital Output #, DOut #, DO#)

デジタル出力用に4つのコラム(1-4)があります。初期設定では1段落分しか表示していません(Column ポップアップメニューから Show Column [37 ページ](#)を選び Output# を選択するとその段が追加表示します)。このコラムのセルはポップアップメニュー形式で、出力の形態を設定します。この機能は外部装置の On/Off 切り替えに使用します。例えば、リレーや指示ランプのコントロール、別の装置へのシグナルの送信用(オートサンプラー、インジェクター、フラクションコレクターなど)に使うと便利です。

PowerChrom 装置にはスイッチデバイス用のリレー接点(CC)が内蔵しており、一定電圧でデジタルデバイスに接続します。初期設定は Open/High のオープン回路で +5V 掛かります。Close/Low で閉回路となり電圧はゼロとなります。Pulse は簡単な電圧変動パルスを出力します。詳しい仕様は本体のオーナーズガイドをご参考下さい。

コメント (Comment)

コメントの入力欄です。このコメントはデータドキュメントの Run Info ウィンドウの Comment 欄にも書き込まれ表示します。

インテグレートコントロール

Integrator Control 欄 [図 4-15, 72 ページ](#)にはディテクターポップアップメニューに示す検出器の情報が表示します。表示する項目から使用する検出器を選択します。2台の検出器からのチャンネルをそれぞれ別個に設定しますが、Entry と Device Control 欄は共通です。エントリ一行の上には各項目の初期設定が表示します。変更する項目のセルに設定値を入力します。インジェクションからの時間設定を一時間にした行は設定が無効でこの欄の行全体に斜線が入ります。この欄の解析パラメータを調整することでベースラインのドリフトによる不都合を取り除き、最適な条件でピークを検出できるように調整します。メソッドメニューで <Simple Integration> を選んだ場合は、最初の2項目分だけが表示し調整できます。

<Expert Integration> を選ぶと全項目が設定できます。

オン / オフ (Integration On, On/Off, On)

このコラムは所定の時間内を演算処理するかどうかの指定をします。(例えば、Off にして負のピークや不必要なフロントピークを外します)。セルをクリックするとチェックボックスは <Off> に切り替わり、その行には斜線が入り無効になります。

On/Off	Threshold	W_{Min}
	2.0%	0.00
<input checked="" type="checkbox"/> On		
<input type="checkbox"/> Off		
<input checked="" type="checkbox"/> On		

スレッシュホールド (Threshold Level, Threshold, Th)

ここでピークを検出する時の最小スロープの変動を設定します。単位はフルスケール%/分で、不必要な小ピークを除外します。設定値を小さくすると、未確認ピークを検出します(デモンストレーションファイルの Demo1 のラン番号 1、2、3 及び 6 を参考にしてスレッシュホールドの変更によるピーク検出の効果を確認して見て下さい)。

最小ピーク幅 (Min Peak Width, Min Width, W_{Min})

ここで設定する最小幅以下のピークは無視します。設定は時間表示で入力しますがサンプリング速度には関係ありません。入力する時間はプレファレンスで設定した少数分単位か時分秒単位になります(図 7-1, 138 ページ)。

最大ピーク幅 (Max Peak Width, Max Width, W_{Max})

ピークの最大検出幅を設定し、広過ぎるピークは無視します。設定は時間単位で入力しますがサンプリング速度には関係ありません。入力する時間の単位は上と同じです(図 7-1, 138 ページ)。

最小ピーク面積 (Min Peak Area, Min Area, A_{Min})

設定値以下の面積のピークは無視します。%(全スケールで共通な単位です)または絶対値を入力します。ここでの単位はメソッド単位に秒を掛けたもの(フルスケールの百分率%.s)になります。この設定で小さいピークや長時間にわたるノイズを除外します。データドキュメントで確認しながら適正値を登録して下さい。

最小ピークハイト (Min Peak Height, Min Height, H_{Min})

最小のピークの高さを決めて、それ以下の高さのピークは無視します。入力単位はフルスケール%(全スケールで共通な単位です)、または絶対値を入力します。不必要に低いピークや長期間にわたるノイズが除外できます。データドキュメントを使って適正値を見つけ登録します。

スキムバイ (Skim Peaks By, Skim By, Skim)

大きいピークと小さいピークが重なる場合、大きいピーク肩の接線方向に小さいピークを削り取って(スキム処理)テーリング・リーディング処理をします(図 4-17)。この段落のセルにはスキムポップアップメニューがあり、スキムする基準を選びます。

No Skimming を選ぶと、重なったピークを垂線、又は谷渡りポイントで強制的に分けます(図 4-18)。

図 4-17
スキム処理ピーク

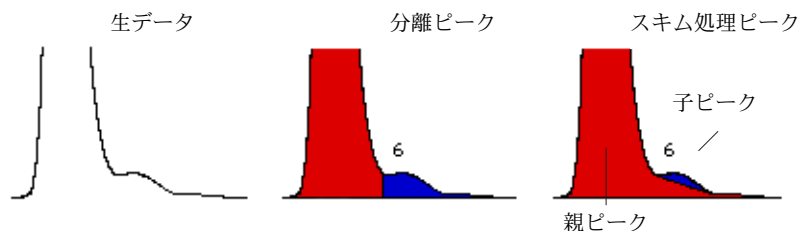
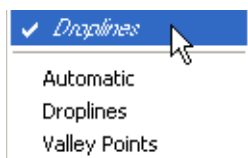
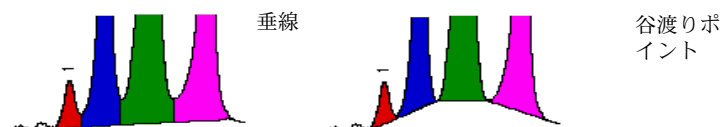


図 4-18
谷渡りポイント



スキムレシオ (Skimming Ratio, Skim Ratio, Ratio)

スキム処理する (削り取る) ピークハイやエリアの割合を Ratio として設定します。デフォルトは 10 で、大小のピーク比が 10 倍以上の重なり合ったピークをスキム処理します (ピークハイは通常谷ポイントからの高さを、エリアはピークの始点と終了点の線より上で読み取ります)。

ベースラインタイプ (Baseline Construction, Baseline Type, Baselines)

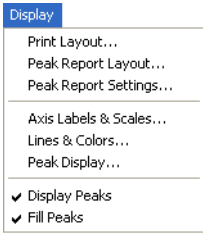
ここではベースラインポップアップメニューからベースラインのタイプを指定します。垂線 (Droplines) か谷渡りポイント (Valley points)、又は自動 (Automatic) にしてピーク毎に適切な方を選ぶ自動選択にするかを指定します。例えばベースが山なりの部分は 'Valley Points Only' にした方が実用的です

ベースラインドリフト (Baseline Drift, Drift)

ベースラインドリフトでピークエリアを決定するのに用いる区間ベースラインの最小勾配を指定し、それによってピークの終了を決定するのに使います。入力単位はフルスケール % (全スケールで共通な単位です) または絶対値を入力します。この段落の単位はスレッシュホールドと同じメソッド単位 / 分で表します。

メソッドディスプレイセッティング

メソッドでプリントレイアウト (レポートのハードコピー) の調整、Display メニュー 図 A-6, 150 ページを使ってクロマトグラムとピークレポートのディスプレイオプションが設定できます。これらのディスプレイ設定はそのメソッドを使ってラン記録したデータドキュメント



だけに適用されます。シーケンスドキュメントからメソッドを使うと、シーケンスのディスプレイ設定が優先されます。

プリントレイアウト

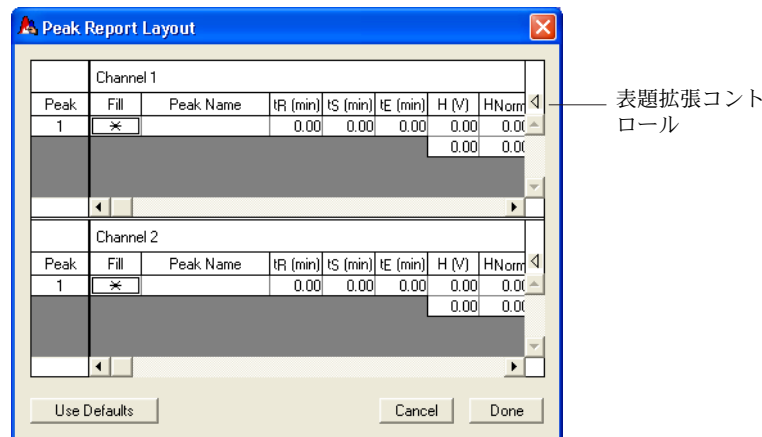
メソッドの作動時には、シーケンスと同様に印刷オプションは使えません。必要ならもって Display メニューから < Print Layout... > を選び (107 ページ) 所定の欄を入力してデータドキュメントを印刷しておきます。後でこのデータドキュメントの印刷設定は変更できません 104 ページ。

ピークレポートレイアウト

データドキュメントのピークレポートウィンドウ 図 6-16, 123 ページには、グラフィックでディスプレイするクロマトグラムの数値情報が全て含まれています。デフォルト設定のドキュメントでは不都合な場合は、Method メニューから < Peak Info Layout... > を選び Peak Report ウィンドウを調整します。Peak Info Layout ダイアログボックス 図 4-19. が出ます。

このダイアログボックスはピークレポートウィンドウと同じ表形式で、データの表示行と幾つかの入力欄が付いています。この行はデータを表示するだけで修正はできません。しかし表示段落のレイアウトは変更でき、行のリサイズ、リネーム、移動、ハイドなどを調整できます (スタイル文字の入力, 38 ページ)。

図 4-19
Peak report Layout ダイアログボックス




ピークレポートセッティング

Display メニューにはさらに特別に、< Peak Report Settings... > オプションが付いており、標準化表示（最大ピーク又は、トータル面積か高さに対する比率）の基準の決定と、表示するピーク幅をどの高さから読み取るかを設定します（[ピークレポートのセッティング](#), 123 ページ）。

クロマトグラムディスプレイセッティング

メソッドドキュメントで Display メニューを使って、クロマトグラムのディスプレイに関する軸ラベル、表示ラインの登録、表示カラー、模様、ピークラベルなどは設定できます。

メソッドドキュメントを使って

メソッドドキュメントをディスクにセーブしておけば（[記録の測定](#), 93 ページ参照）、それを使ってシングルランのデータドキュメントを作り後で利用するか、シーケンスドキュメントに取り込んで（[メソッドやキャリブレーションを管理する](#), 81 ページ参照）複数のランに使用しそのデータドキュメントを作成することができます。メソッドはデータドキュメントに複写できますので、File メニュー  [A-4](#), 149 ページ で Run Append... を選びランを追加したり解析するのに使用できます。データの記録に使用したハードウェアのセッティングは変更できませんが、後で解析パラメータを変更することは可能で、全く別のメソッドで再解析できます。

単一のメソッドを使って、データドキュメントに準じランを追加するのは良い方法です。記録するランの数が少なく、わざわざシーケンスドキュメントの構成をする必要がない場合は有効です。

シーケンスドキュメント

シーケンスドキュメントはキャリブレーション、メソッド、印刷作業を管理して複数のランを自動的に処理するプログラムです。

シーケンスドキュメントを作るには：

- ・ Easy Access ウィンドウ [図 2-3, 11 ページ](#)の < New Table > ボタンをクリックして New Table ダイアログボックス [図 4-7, 58 ページ](#)を呼び出すか、
- ・ File メニューから < New... > を選び New Table ダイアログボックス [図 4-7, 58 ページ](#)を呼び出すか
- ・ 既存のデータドキュメントのサンプルテーブル ([129 ページ](#)) 表示させます。

シーケンスの Sample Table ウィンドウ [図 4-20](#) が二の区画で表示します。

- ・ 上段はコメント欄で、コメント表題の下に最大 32,000 文字のコメントが入力できます。
- ・ 下段はそれに対応する表形式のサンプルテーブルで、サンプルコントロール部 ([85 ページ](#)) とキャリブレーションコントロール部 ([86 ページ](#)) の区画に分かれています。コラムはリサイズ、レリネーム、配置換え、及び隠すことができます ([スタイル文字の入力, 38 ページ](#)参照)。

シーケンスメニュー

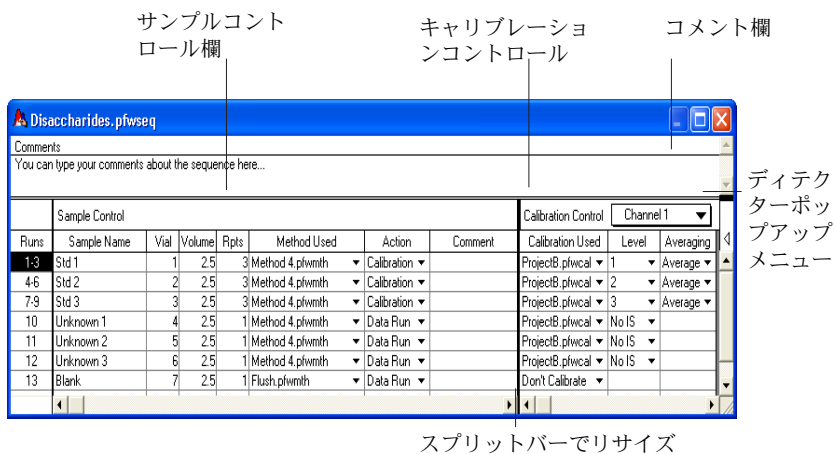
シーケンスドキュメントが開いておれば、Sequence メニュー [図 A-11, 151 ページ](#)が有効です。< New Calibration > や < New Method > コマンドでシーケンスドキュメント内に キャリブレーションやメソッドドキュメントが組み込めます。

< Manage Calibration > や < Manage Methods > コマンドで、外部のキャリブレーションやメソッドドキュメントを組み込んだり、連結させたりできます。シーケンスドキュメント内に組み込まれている内部キャリブレーションや内部メソッドは Windows メニューにその名称が表示します。



Sequence

New Method
New Calibration
Manage Methods...
Manage Calibrations...

図 4-20
シーケンスドキュメントの
Sample Table ウィンドウ



ドキュメントをリンクする

シーケンスには内部メソッドやキャリブレーション（シーケンスドキュメントに組み込ませて）を組み込むことができますし、コンピュータのハードディスク上にある外部のメソッドやキャリブレーションドキュメントとリンクさせることができます。どちらもシーケンスドキュメント内で作成するか、既存のドキュメントからロードします。リンクされたメソッドやキャリブレーションドキュメントはドキュメントアイコン（ か ) で表され、ダイアログボックスとポップアップメニューに表示します。シーケンスは必要に応じて外部ドキュメントの情報を読み込み、コピーし、その結果生ずるデータドキュメントに組み込みます。

必要に応じて内部、外部キャリブレーションやメソッドを使い分けることができます。

メソッドやキャリブレーションを管理する

メソッドやキャリブレーションが組み込まれていない新規作成のシーケンスドキュメントには、サンプルテーブルの該当段落が空欄になっています。シーケンスドキュメントに組み込むメソッドやキャリブレーションの作成及び編集は、< New Method > 又は、Sequence メニューから < New Calibration > を選びます。それぞれの新規ウィンドウが開きます（[図 A-11, 151 ページ](#)）。

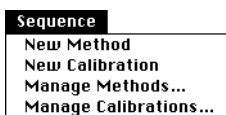
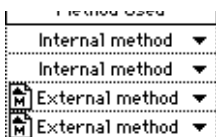
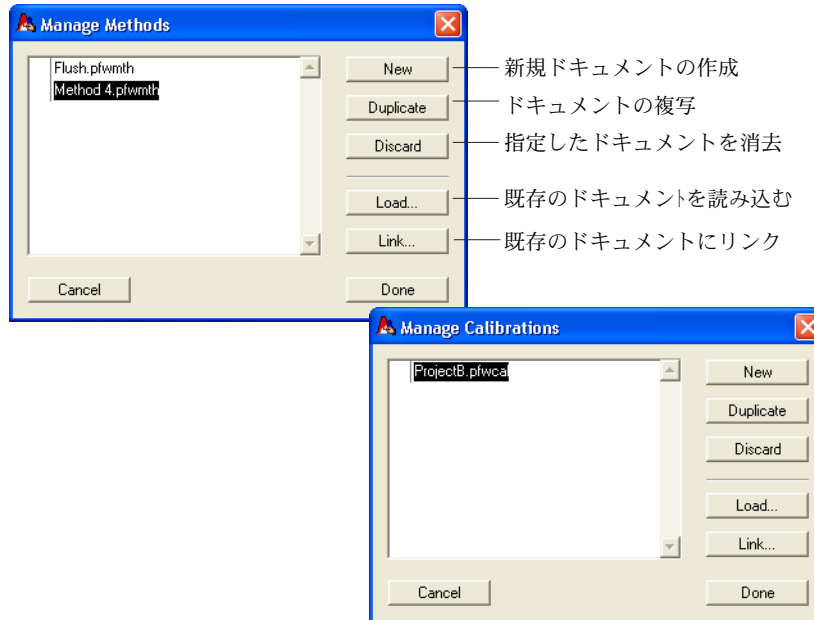


図 4-21

Manage Methods と
Manage Calibrations のダイアログボックス



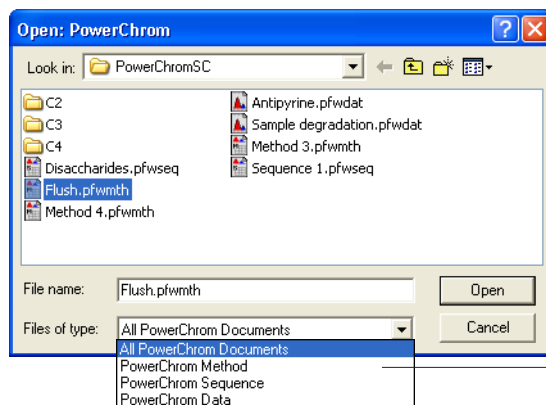
シーケンスに組み込まれたメソッドやキャリブレーションは外部ドキュメントとして通常通り修正できます (page 58 及び 71 ページ参照)。内部メソッドやキャリブレーションウィンドウがアクティブの時は、Metgod や calibration メニューが Display メニューの次に表示します。

Manage Methods や Manage Calibrations ダイアログボックス 図 4-21 は Sequence メニューの <Manage Methods...> や <Manage Calibration...> と一体になっています。

<New> ボタンをクリックして新規メソッドやキャリブレーションを作成すると、その名称がスクロールリストに載りますので、そこから必要なものを指定します。デフォルトで名称は、Method 1、Method 2、Calibrayion 1、Calibration 2 の順に番号が付きます。必要に応じて任意の名前が付けられます。

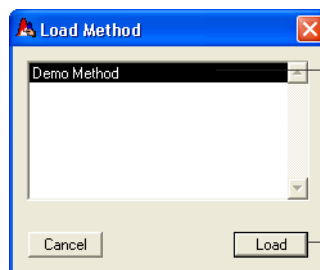
スクロールリストから一つの項目を選べばそれを編集できます。複数の項目を選ぶには隣接するメソッドやキャリブレーション名をシフト-クリックかシフト-ドラッグするか <Ctrl>-クリック (Macintosh では -クリック)、で選択します。また、Edit メニューから <Select All> で全項目を選択、または一つの項目の編集する全文字

図 4-22
Load Method ディレクト
リーダイアログボックス



ドキュメントの形式を指定
表示させる

図 4-23
読み込むメソッドを選ぶ



クリックしてメソッドを選ぶ

選択したメソッドを読み込んで取り込む

が選択できます。< Duplicate > ボタンをクリックするとメソッドやキャリブレーションを複製します。< Discard > ボタンでメソッドやキャリブレーションが消去します

メソッドやキャリブレーションを読み込む

< Load ... > をクリックすると、シーケンスキュメントに組み込まれているメソッドやキャリブレーション（外部メソッドやキャリブレーションでも、別のシーケンスやデータドキュメントに組み込まれたものでも）を読み込めます。まず、そのディレクトリーダイアログボックス 図 4-22 が表示します。

データ及びシーケンスドキュメントには複数のメソッド（又はキャリブレーション）を取り込むことが可能で、その場合にはダイアログボックス 図 4-23 に示す様に取り込むメソッドを選択する必要があります。

図 4-24

Link Method ダイアログボックス
リーダイアログボックス
Link Calibration も同様

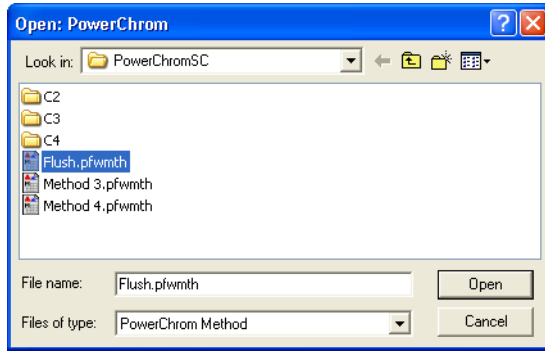
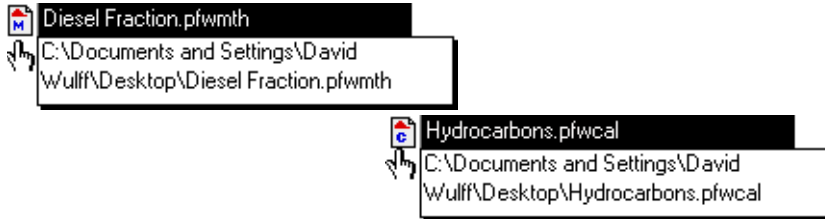



図 4-25



リンクしたドキュメントを
読み込む






ロードしたメソッドやキャリブレーションを、既にシーケンスに含まれているメソッドやキャリブレーションと同じ名称で扱おうと、警告表示が出ます。再度名称を変えるか、既存のメソッドやキャリブレーションを書き換えます。

メソッドやキャリブレーションをリンクさせる

<Link...> ボタン  をクリックすると、Link Method または Link Calibration ダイアログボックス [図 4-24](#). が出ます。ここでシーケンスに外部メソッドやキャリブレーションがリンクできます。

ファイルがリンクすると、Manage Methods や Manage Calibrations ダイアログボックスが呼び出せます（内部ドキュメントと区別するために  や  アイコンで表示）。

リンクしたファイルはリネームしたりハードディスク上を移動しても残ります（シーケンスを開いたり、保存したり変更する際にリンクを認識します）。リンクしたファイルが見つからない時は、アイコンが変わり  リンクが外れた事を示します。シーケンスを使うか Verify

すると(92 ページ)不明ファイルの場所を知らせてくれます。手動でリンクさせたファイルを見つけるには Manage Methods か Manage Calibrations ダイアログボックス 図 4-25 を呼び出し、そのファイルのドキュメントアイコン  や  をクリックします。そのファイルネームの全履歴のパスネームか最終既知ロケーションを表示します 図 4-25。

メソッドやキャリブレーションの修正

シーケンスに組み込まれている内部メソッドやキャリブレーションは通常通り、外部ドキュメントの様に修正できます(58 ページや 71 ページ参照)。シーケンスドキュメントの Windows メニューを使えば、取り込んだドキュメントにアクセスできます。

サンプルテーブル

サンプルテーブルの下欄は本来の表形式な段落 図 4-20, 81 ページです。各段落のコラムタイトル表示は変更できます(Format Columns ダイアログボックス 図 3-17, 37 ページを使って変更します)。表題の名称は変更できません。3 種類の表記法のうち、コラム幅に従ってその一つが表示します。下記に各コラムの説明をしますが、太文字は正式名を示しており変更はできません。それに続き全名称、略名コラムタイトルを示します。

Run Numbers (Run Numbers, Runs, #)

ラン番号の一覧表示します。このセルの表記は修正できません。このコラムのセルをクリックするとその行全体が選択され、シフトクリックで隣接行が選択できます。反復エントリー行はその範囲を表示します(例、12-17)。この行の表示方法は、一覧表示にするか圧縮表示にするかが Edit メニュー 図 3-23, 42 ページで変更できます。各行はシーケンスを使って作成するデータドキュメントの各ランに対応します。

サンプルコントロール

サンプルコントロール欄には 図 4-20, 81 ページ 次のコラムが含まれます:

Sample Name (Sample Name, Name)

このセルには分析する試料の名称を入力します。記録時にはステータスパネル(図 5-5, 95 ページ)にこの名称が出ますし、データドキュメントのランミニウィンドウ(図 2-12, 21 ページ)にも表示します。

Vial Number (Autosampler Vial, Vial Number, Vial)

このカラムはサンプル名の区別に加えて、接続するオートサンプラー等にも使われる試料番号も表記できます。



Inject Volume (Inject Volume, Volume, Vol)

インジェクション量を入力します。

Repeats (Repeats, Rpts)

誤差を少なくする為に、同じ試料を複数回インジェクションしてその平均を記録する場合があります。この欄には試料インジェクションの繰り返し回数を入力します。入力回数と同じ行数が作成され、Run Number コラムにその範囲が表示します。

Method Used (Method Used, Method)

各エントリー行毎に使用するメソッドが指定できますので、別個のキャリブレーションやメソッドを使う試料が同時に処理できます。各セルにメソッドポップアップメニューで使用するメソッドを選びます。シーケンスドキュメントに付いているメソッドとリンクしているメソッドが全て一覧できます。リンクしたドキュメントは  や  のアイコンで表示されます。このメニューにはシーケンスメニューと同じコマンドを持ち (80 ページ)、新規作成も可能ですし外部のメソッドやキャリブレーションにもリンクできます。

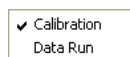
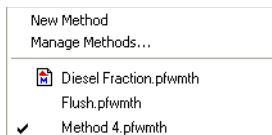
Action (Action)

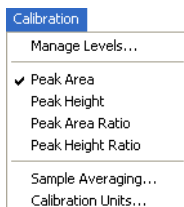
Action ポップアップメニューを使って選択します：

- ・ < Calibration > : 定量計算の為にキャリブレーションテーブルを更新するのに使います。更新する濃度レベルと更新の様式は、Calibration Used コラムで指定します。通常はデータランを実行する前に、キャリブレーションテーブルで各濃度レベルを更新します。
- ・ < Data Run > : クロマトデータを記録してピークを検出し、校正して演算処理します。定量分析では Method Used と Calibration Used コラムのエントランスに従ってピーク演算解析をします。

Comment (Comment)

このコラムに説明文が入力できます。





キャリブレーションコントロール

サンプルテーブルの Calibration Control 段落にはポップアップメニューで指定した [図 4-20, 81 ページ](#) 検出器のキャリブレーション情報を表示します。1 つの分析 (カラム) 系に 2 台の検出器 (蛍光検出器と電気化学検出器など) が個別に設定できます。Detector ポップアップメニューで指定する検出器のチャンネルを選び、そのコンフィグレーションを設定します。従って、サンプルテーブルの 1 行に両検出器の情報が含まれます。

Calibration Used (Calibration Used, Calibration)

このポップアップメニューにはシーケンス内部、及びそれに連結したキャリブレーションが総て一覧で表示されます。2 台の検出器を使う場合は、各々別のキャリブレーションを使います。カラム洗浄などキャリブレーションを使わないランには < Don't Calibrate > を選んで下さい。連結しているドキュメントには左にアイコンが付いています。又キャリブレーションを使わないランには Don't Calibrate を選んで下さい。

このセルのポップアップメニューの中にはシーケンスメニューと同じキャリブレーションを管理するコマンドが入っておりとても便利です ([80 ページ](#))。Windows メニューで新規作成、又は読み込むキャリブレーションが選べます。

Calibration Level (Calibration Level, Level)

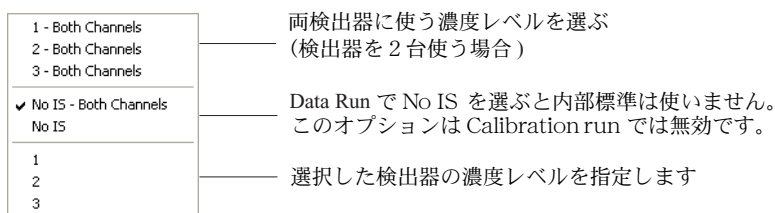
このポップアップメニュー [図 4-26](#) でキャリブレーションドキュメントの濃度レベルを選び、更新 (Calibration run) や導入 (Data run) します。

このメニューには下記の場合 ' NOT ' が出ます :

- ・ < Calibration Used > コラムに ' Don't Calibrate ' を選ぶか
- ・ データランで、キャリブレーション処理の際に面積比やハイト比がゼロの場合は、内部標準量を一定量に固定して処理します。

図 4-26

キャリブレーションレベルの一例、設定によっては総てのオプションが有効とは限りません

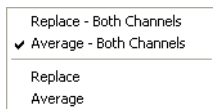


特定の濃度レベルでその検出器をキャリブレーションしない場合（例えば、別の検出器しか濃度レベルが該当しない場合）は Calibration Used コラムで < Don't calibrate > を選んで下さい。

内部標準を使ってデータランを行う場合でも、面積比やピークハイト比ではキャリブレーションしない場合は、レベルには試料中の内部標準物の量を表記します。

Averaging Option (Averaging Option, Averaging, Avg)

このセルにはアベレーシングポップアップメニューがあり、キャリブレーションドキュメントを更新するキャリブレーションランの様式を選びます。両検出器共通（上二つのコマンド）、又は個別のコマンドを選びます。Calibration Used コラムで < Don't calibrate > を選ぶと、このメニューは無効となります。



シーケンスを使った作業が終了すると、作成されたデータドキュメントには元のキャリブレーションの複製と各キャリブレーションランに対応した更新バージョンが組み込まれます。連結した外部キャリブレーションドキュメントはシーケンスランで更新され、そのデータドキュメントの最終バージョンと一致します。シーケンス内の内部キャリブレーションはシーケンスを使っても変更されません。従って、データドキュメントの元のバージョンと同じです。再度そのシーケンスを使うと元の同じキャリブレーションで働きます。

< Average > を選ぶと、キャリブレーションテーブルのそのレベルのデータがキャリブレーションラン毎に平均化され、平均様式はキャリブレーションドキュメントでの設定に従います（詳細は[サンプルの平均処理, 60 ページ](#)を参照下さい）。< Replace > を選ぶと、キャリブレーションテーブルのそのレベルの既存のデータが新しいものと入れ替わります。

圧縮行で < Replace > を選ぶと（即ち、ランのカラム行を範囲で表記されている場合 [図 4-9, 60 ページ](#)）、その範囲の最初のランでのキャリブレーションパラメータだけが入れ替わり、それに続く行は自動的に < Average > に設定されます。行を拡張表示すると（[42 ページ](#)）、最初のセルは < Replace > でそれに続くセルは < Average > となります。

シーケンスのディスプレイセッティング

シーケンスを使って作成されるデータドキュメントのディスプレイオプションは、シーケンスドキュメントにある Display メニューのコマンドを使って設定します。このコマンドはメソッドの場合と同じ様に

機能します。参照：[メソッドディスプレイセッティング, 77 ページ](#)。
個々のメソッドで使われるディスプレイオプションはシーケンスでは
使用できません。

シーケンスドキュメントを使う

シーケンスドキュメントを作成し設定を終えると、不適切なエント
リーをチェックするための検証ができ（参照：[ドキュメントの確認, 92 ページ](#)）、自動的に一連のメソッド（参照：[記録の測定, 93 ページ](#)）
を使ってランが実行できます。オートサンプラーを使い、メソ
ッドドキュメントの < Output > コラムを適正に設定すれば（参照：
[デバイスコントロール, 74 ページ](#)）、シーケンスでオートサンプ
ラーをコントロールして各ランにサンプルを順次インジェクションし
ランが自動化できます。

シーケンスで作成されたデータドキュメントにはそのシーケンスに使
われたメソッドやキャリブレーションドキュメントの複製が組み込ま
れています。キャリブレーションテーブルがシーケンスドキュメント
で更新されると、派生したデータドキュメントにもその処理の程で作
成されたキャリブレーションドキュメントの複製が組み込まれます。
参考：[キャリブレーションのバージョン, 133 ページ](#)。

5

CHAPTER FIVE

ファイルの取り扱い

この章では既存のファイルに新しくデータを加えたり、メソッドランやシーケンスランを使う過程ですべてが正しく行われているかをチェックするためのドキュメントを確認する方法について説明します。

プログラム中のドキュメントは様々な方法で編集、印刷、保存ができます。これらの方法についても説明します。

ドキュメントの確認

キャリブレーション、メソッド、シーケンスを設定する時、特に既存のデータから新しいドキュメントを作成する時には注意することがたくさんあります。ドキュメントのチェックをするにはそのドキュメントのメインウィンドウを開き File メニュー中の < Verify > コマンドを選択して下さい。

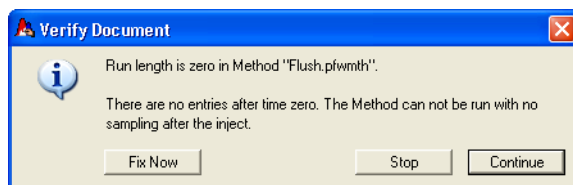
選択するとそのドキュメントの問題点を探し出します。どのドキュメントでもこの確認作業はできます。確認作業の中ではそのドキュメントとリンクされているドキュメント全てについてチェックが行われます。一つのエントリーに異なるキャリブレーションレベルの検出器が使われているなどの異常についても確認されます。確認作業では一つのドキュメントに関連する全ての要素について確認が行われます。もしも欠けている部分があっても自動的に必要なファイルが含まれている場所を探し出します。

確認作業が終了すると問題の有無に関わらずメッセージが表示されます。問題がある場合にはその問題点が一つずつ Verify Document ボックス [図 5-1](#) に表示されます。

< Fix Now > ボタンをクリックすると問題のある箇所に移動するのでデータの修正を行って下さい。ボタンをクリックしても問題のある箇所に移動できない場合には、オリジナルのファイルを修正して下さい。

問題箇所を訂正後、再度ドキュメントの確認作業を行い、問題が全て解決したかをチェックして下さい。

図 5-1
Verify ドキュメント警告
ボックス



File	
New...	Ctrl+N
Open...	Ctrl+O
Open Append...	
Run...	Ctrl+R
Run Append...	

Close	Ctrl+W
Save	Ctrl+S
Save As...	
Save Method As...	
Save Calibration As...	
Verify	
Revert to Saved	

Page Setup...	
Print...	Ctrl+P
Print Window...	

Exit	Ctrl+Q

記録の測定

既存のメソッドやシーケンスのファイルを使用する時は Easy Access ウィンドウ [図 2-3, 11 ページ](#) の Run Table ボタンをクリックするか、File メニュー [図 A-1, 148 ページ](#) から Run コマンドを選択するか、Command キーを押しながら <R> をタイプして下さい。いずれのケースでもランテーブルディレクトリダイアログボックス [図 5-2](#) が表示します。

Print Report チェックボックスはシーケンスのラジオボタンを選択した時のみ使用可能となります。このボックスをチェックした状態になるとシーケンスランで各ランの終了時にレポートを印刷します。レポートの内容については [印刷, 104 ページ](#) と [プリントレイアウト, 107 ページ](#) を参照下さい。

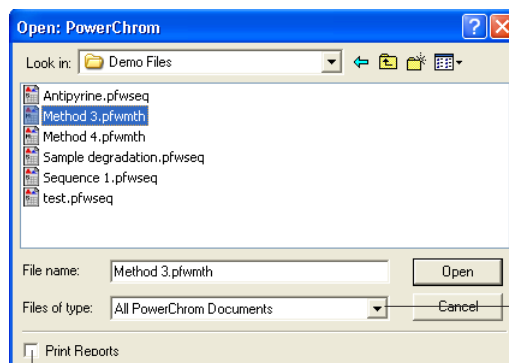
ドキュメントの確認 [92 ページ](#) で詳細を説明します。

メソッドランを行う

メソッドファイルを開くと新規の '未名称データドキュメント' が作成され測定が始まります。データはクロマトグラムウィンドウに波形として表示されます。ウィンドウの大きさは記録中に変更することが可能です。

測定中はステータスパネルミニウィンドウが表示されます [図 5-3](#)。ミニウィンドウは測定中、常に画面の上部に表示されていて、自由に場所移動できます。インジェクトシグナル ([50 ページ](#)) が必要な場合にはハードウェアに自動インジェクション装置を接続するか、マニユ

図 5-2
ランテーブルディレクトリダイアログボックス



表示するドキュメントの形式を選ぶ

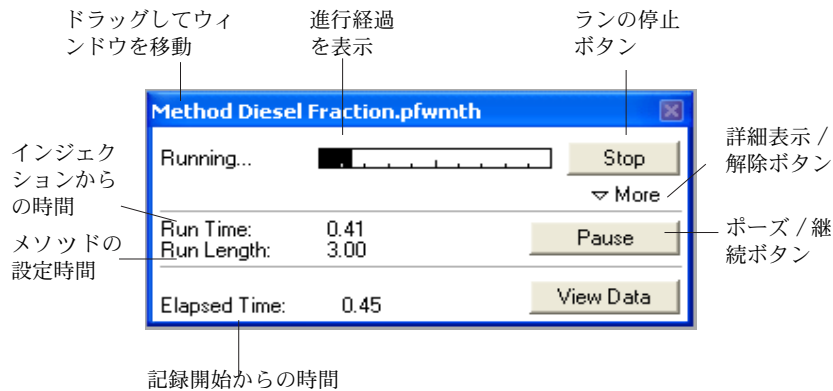
All PowerChrom Documents
PowerChrom Method
PowerChrom Sequence

このオプションはシーケンスの起動時のみ有効です [95 ページ](#)

アルインジェクションのようにミニウインドウの Injection ボタンをクリックするか、<Ctrl> キー（Macintosh では **⌘**）を押しながら <J> をタイプして下さい。

図 5-3

メソッドのステータスパネルミニウインドウ



ミニウインドウに表示されている測定時間の単位は全て設定した時間の単位で表示されます（少数点分単位か時分秒単位）。Elapsed Time は測定にかかった総時間を表し、ここには測定開始前のセットアップの時間も含まれるので通常ランタイムより長くなります。

測定を終了する場合には <Stop> ボタンをクリックして下さい。ミニウインドウは画面から消え測定画面のみが画面に表示されている状態になります。

Run Time を止めるには <Pause> ボタンをクリックして下さい。ボタンの表示は <Continue> に変わります。<Pause> ボタンを押してから <Continue> ボタンを押すまでの時間はデータの記録はそのまま行われますが、Run Time は停止した状態になります。記録後の計算は全て Elapsed Time を使用して行われるため、<Pause> ボタンの使用が計算値に影響することはありません。測定サンプルのインジェクションは <Pause> ボタンを押している間は停止します。<Continue> ボタンをクリックすると再度インジェクションが始まり、Run Time も動き始めます。この機能はメソッドで設定した測定時間に対してピークの検出が遅い場合などに便利です。

メソッドランが終了するとランは自動的に計算されます（75 ページ）。ミニウインドウには 'Finished' と表示されます。画面上に残っているデータを保存する場合は名前を付けて保存して下さい。

シーケンスランを使う

シーケンスランでは一つのファイルで複数回のデータ測定を行い、データは各ランの終了時に自動的に保存されるので、測定を行う前にデータを保存しておくためのドキュメントを作成する必要があります。シーケンスファイルを開くと、まず、データ保存ディレクトリダイアログボックス（図 5-4）が表示されるので、そこでデータを保存するファイル名を決定して下さい。ファイル名を入力し、< Save > ボタンをクリックすると測定が始まり、ステータスパネルミニウインドウ 図 5-5 が表示されます。< Skip > ボタンをクリックすると現行のランが停止し、シーケンスの次のランが始まります。シーケンスの途中で停止し、セッティングを調整してから < Run Append > コマンドを使って再開することも可能です。

外部のインジェクション信号を使う場合は、シーケンスは自動的にこの信号でランの開始を制御します。シーケンスを使ってマニュアルでサンプルをインジェクトすると、PowerChrom がインジェクション信号待ちの時はコンピュータのピープ音で確認できます。

図 5-4
Store Data ディレクトリダイアログボックス

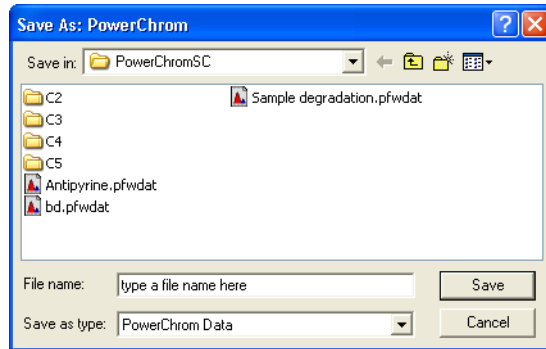
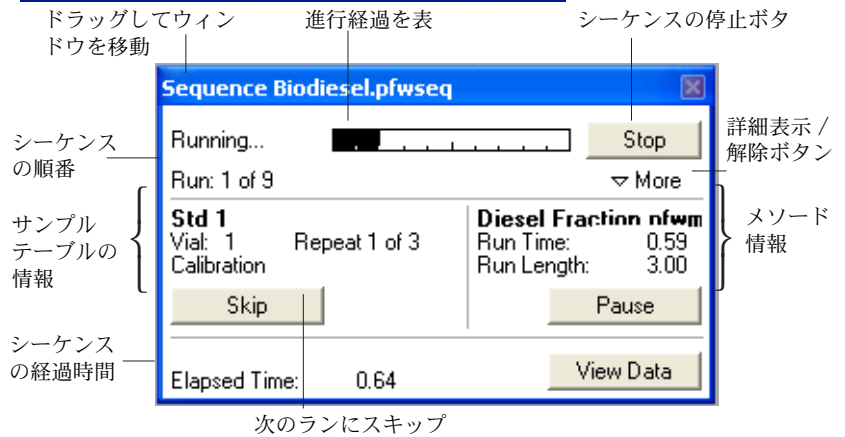


図 5-5
シーケンスの StatusPanel
ミニウインドウ



ランを追加する

データドキュメントが保存してあれば、新たなクロマトランデータをそこに追加できます：

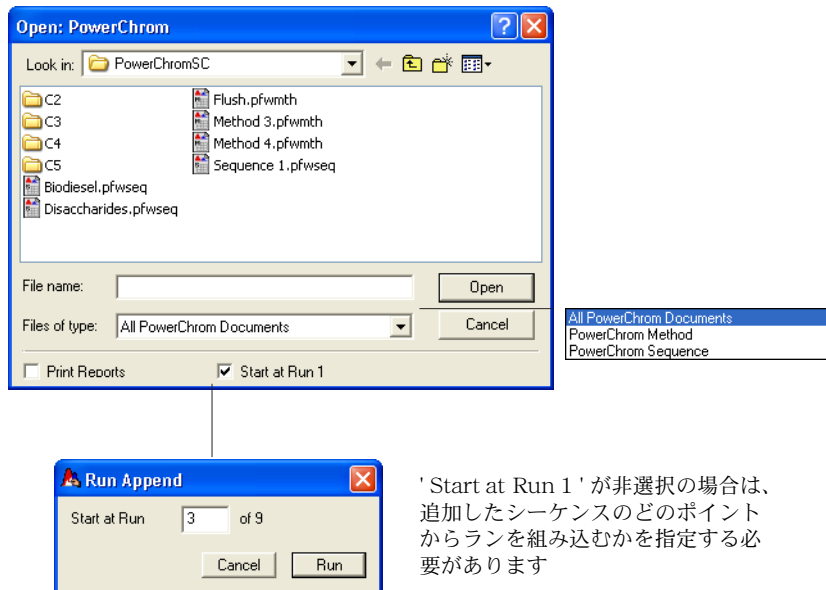
Start

・マニュアルサンプリングでデータドキュメントにランデータを追加するには、クロマトグラムウィンドウの右上の < Start > ボタンをクリックします (図 2-11, 17 ページ)。Manual Sampling ダイアログボックス 図 2-9, 15 ページ が出ますので、必要に応じて実行するランをセットアップし (記録を開始すると、そのドキュメントで使用したマニュアルサンプリングの設定で作動します)、ダイアログボックスの < Start > ボタンをクリックします。または、

・テーブルを使ってデータドキュメントの新規ランを追加するには、ファイルメニューから < Run Append... > 図 A-1, 148 ページ を選びます。Run Append ダイアログボックス 図 5-6 が出ます。ランテーブル・ディレクトリーダイアログボックス 図 5-2, 93 ページ と同じ様に、使用するテーブルタイプが、メソッドなのかシーケンスなのかを指定します。指定したテーブルの一覧がスクロールリストに出ます。追加したランのメソッドやキャリブレーションは、その複製が既に存在しない限りデータドキュメントに組み込まれます。追加されたメソッドやキャリブレーションが以前に組み込まれたドキュメントと同じ名称を持っている場合は、新規ドキュメントには名称に末尾に番号が付きます。

図 5-6

Run Append ディレクトリーダイアログボックス



新しいランは常に既存データドキュメントの末尾に追加されます。そのクロマトグラムは記録される様に表示されますが、ランボタンを使えば別のランも閲覧できます(図 3-8, 32 ページ)。記録中のランに戻すにはそのランボタンをクリックするか、ステータスパネルのビューデータボタンをクリックします(図 2-10, 16 ページのマニュアルラン、図 5-3, 94 ページのメソッドラン、図 5-5, 95 ページのシーケンスラン)。

シーケンスを追加する際は(複数のランを含む)、『Start at Run 1』チェックボックスを非選択とした場合、追加したシーケンスのどのランから追加するかを指定できます。スクロールリストで使用するシーケンスを指定すると、Start at Run テキストエントリーボックスがタイム表示となり、そのシーケンスのトータルラン番号が表示します。



< Print Report > チェックボックスをマークすると、各ランの終了時にデータのレポートを印刷します。詳細は印刷, 104 ページ, と プリントレイアウト, 107 ページ を参照して下さい。

データドキュメントのデータ容量

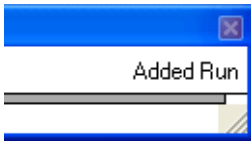
一つのデータドキュメントには最大 999 ランまで(追加分を含め)記録できます。しかしランデータ数が多すぎるとファイルは膨大になり、操作に長時間要します。ファイルを読み取ったり、ディスクにセーブするにも数分かかってしまい実用的ではありません。ファイルをセーブするにも十分な空き容量が必要で、メモリー不足による不測のトラブルも起こり兼ねません。また、特定のランを検索するにも大変不便です。一つのドキュメントのデータ容量は、少な目にした方が機能的で便利です。

データの編集

テーブルの修正は第 4 章で説明しました通り、キャリブレーション、メソッド、シーケンスの各ドキュメントを調整する上で重要な操作です。データドキュメントのランデータも同様にドキュメントに、削除、コピー、ペーストができます。

ズームツール  を選ぶと(図 6-1, 112 ページ)、Edit メニューのコマンド  はデータラン全体に作用し変更にも随時対応します(< Cut > は < Cut Run...> になるなど)：

- ・ < Cut Run > で任意のランを(そのランボタンは強調表示しませんが) ファイルから除き、クリックボードに書き換えます。



- ・ < Copy Run > はクリックボードに任意のランデータを書き込みます。
- ・ < Paste Run > はクリックボードに書き込んだランデータをデータドキュメントの末端に追加します。クリックボードに何もランデータが無い場合は、このコマンドはダイム表示となり使用できません。
- ・ < Delete Run...> はファイルから任意のランデータを削除します。通常のキーショットカットも有効です [147 ページ](#)。

ランデータをペースト（貼り付け）する

ランデータをデータドキュメントに追加すると、追加したランデータがアクティブの時はランミニウインドウの右側に Added Run のメッセージがでます。追加したランのインテグレーションセッティングを変更するか、そのピークを解消するまでピーク解析はできません。これはこのランの解析に使用した元のメソッドがコピーされていない為です。必要なら、Data メニューの < Manage Methods > コマンドを使ってメソッドを取り込むこともできます、[102 ページ](#)。

データの移動と再収録

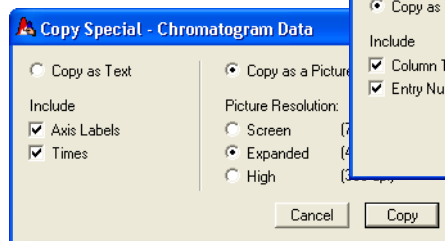
< Cut Run... Z > と < Delete Run... > では操作の確認メッセージが出ます。この警告表示が不要の場合は、Macintosh では Option キーを押しながらこのコマンドメニューかそのショートカットキーを入力します [152 ページ](#)。Edit メニュー [図 A-1, 148 ページ](#) には取り消しコマンド (Undo) も入っており、最後のアクションが取り消せます。例えば、ランを修正する時は、このコマンドメニューは < Undo Run Editing > に、修正後は < Redo Run Editing > と切り替わります。File メニュー [図 A-1, 148 ページ](#) の < Revert to Saved > を選択すると、最後にディスクにセーブしたデータに復帰させる事ができます。

データを転送する

表計算ソフトや統計パッケージ、図形プログラムなど別のアプリケーションにデータを転送したい場合があります。これにはクリックボードへのコピー & ペースト [図 A-2, 148 ページ](#)、又は File メニューから < Save As... > コマンドメニューを使い ([図 A-1, 148 ページ](#)) 標準のテキストファイルとして様々な形式でデータをセーブして実行します。テーブルからコピーした段落は、クリックボードウインドウにタブ切りテキストとして 1 行で表示され、各行にはリターン記号が入ります。

図 5-7
Copy Special ダイアログ
ボックス

テーブルウィンドウ
がアクティブの時



クロマトグラムウィ
ンドウがアクティブの時

データはこの形式で別のプログラムにペーストできます。パワークロムデータのラン全体を別のソフトウェアにコピー & ペーストできるわけではありません。これはそのソフトウェアがパワークロムのランデータ構成が認知できわけでは無いからです。しかしクロマトグラムやレポートテーブルなどはコピー & ペーストできます [コピースペシャル, 99 ページ](#)。

コピースペシャル

パワークロムのプログラムでディスプレイされるテキストや図形データの大部分は、クリックボードに複写してデータが転送できます。これには、Edit メニューから < Copy Special... > コマンドを選び、Copy Special ダイアログボックス [図 5-7](#) を呼び出します。ダイアログボックスの上段には二つの主要なオプション、< Copy as Text > と < Copy as a Picture > があります（アクティブウィンドウに図形データの表示が有る場合）。

< Copy as Text > : アクティブウィンドウのデータはクリックボードにタブ切りテキストとして書き換えます。データのコピーは：

- ・クロマトグラムでは、ウィンドウに表示するデータポイントをテキストとして記録し、ウィンドウの任意のセレクションで実行します（データだけを選ぶには、セレクションをダブルクリックしウィンドウサイズを拡大します）。左から右の表記段でチャンネルデータを縦に表示します。Times チェックボックスをマークすると、データ表記段落の前に記録時間が表示します。Channel Titles チェックボックスをマークすると、縦軸に登録したラベルがテキストの最初の行に入ります。

- ・テーブルウィンドウでは、テキストは指定した段落又は、全行のテキストデータになり、Peak Info の様に複数の区画があるテーブルではアクティブな区画（最後にクリックした）がコピーされます。

< Copy as a Picture > クロマトグラムウインドウやレスポンスカーブ（検量線）ウインドウの図形が、そのままクリックボードに複写されます。図形をコピーする分解能のオプションには3種類あります。

- ・ < Screen > は 72ドット/インチの標準ビットマップ（PICT）の画面と同じ分解能でコピーしますので、モニターで見るのと同じ図形を別のアプリケーションにペーストできます。

- ・ < Expanded > は表示の4倍拡大した図形をコピーします。これを別のプログラムにペーストすると、288dpiの分解能が出ます。ワープロソフトウェアなどにクロマトグラムを高分解能でペーストできます。

- ・ < High > 300dpiになり通常のレーザライターと同じ分解能になります。

'enhanced metafile' グラフィック（MacintoshではQuickDraw PICT）の場合は、その特有な分解能で作成されクリップボードに書き込みされます。

ピークインフォメーションを取り出す

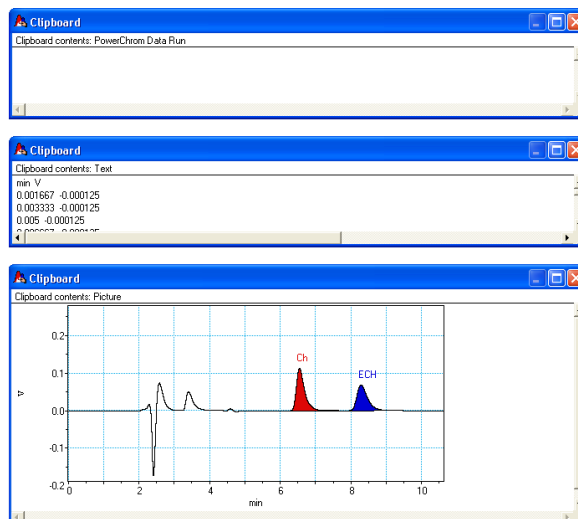
クロマトグラフではピークの大まかな情報が必要になります。各ランの測定した化合物の濃度変動が直ちに判ります。これには、Editメニューから< Export Peaks > コマンドを選びます。現行のデータドキュメントに含まれる総てのランに有る総てのピーク名が抽出できます。ピーク名はキャリブレーションテーブルのName欄の名前に対応しています。ピーク名はPeak ReportウインドウのName欄に直接入力します。抽出できる情報はPeak Reportウインドウの一部で、リテンションタイム、面積、ピークハイト、濃度などで検出器毎にラン番号別に分類されます（図5-8）。このデータはタブ切りでクリップボードにコピーされ、直接表計算ソフトウェアにペーストできます。

図 5-8

Export Peaks コマンドを使って抽出した情報をスプレッドシートにペーストした例

	A	B	C	D	E	F	G
1	Detector	Run	Name	Ret. Time	Area	Height	Amount
2		1	1 dirt	13.98	281.52	10.28	10
3		1	2 dirt	13.84	270.56	9.98	
4		1	3 dirt	13.86	271.36	10.08	
5		1	1 Dustbin	2.35	487	19.73	5
6		1	2 Dustbin	2.32	395.36	16.14	
7		1	3 Dustbin	2.32	420.32	17.72	
8		1	5 Dustbin	2.36	374.86	18.72	
9		1	1 Dusty	4.19	401.31	6.22	5
10		1	2 Dusty	4.13	281.83	5.83	
11		1	3 Dusty	4.13	447.21	6.32	
12		1	4 Dusty	4.07	434.59	7.23	

図 5-9
クロマトグラムウインドウ
からコピーした後のクリッ
プボード



コピーコマンドを
使ってランを複写
する

コピースペシャル
コマンドを使って
テキストとして複
写する

コピースペシャル
コマンドを使って
画像として複写す
る

クリップボード

データをコピーしたり削除する場合は < Copy Special... > コマンドメニューか、Cut や Copy コマンドを使ってクリップボードに情報を集めます。Edit メニューから < Choose Show Clipboard > か、Windows メニューで < Clipboard > を選んで、クリップボードウインドウを出しコピーする内容が見れます。 .

セーブオプション

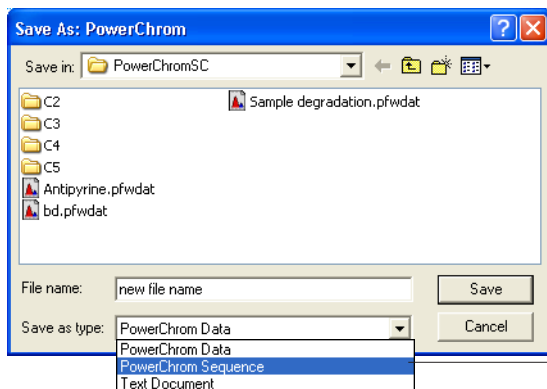
ドキュメントをセーブするには File メニューで < Save > か < Save As > を選びます [図 A-1, 148 ページ](#)。セーブを実行すると既存のドキュメントがそれに置き換わり、ディスクにセーブされます。

< Save As > を選んだ場合はドキュメントをセーブする形式も選べます [図 5-10](#)。

セッティングファイルを作成するには Edit > Preferences > Save Settings... コマンド [141 ページ](#) から作成できます。

図 5-10

Save Document As ディレクトリーダイアログボックス



F フォーマットオプションはセーブするドキュメントの形式で変わります。Stationery Option.. は Macintosh だけ有効です

シーケンスを取り出す

データドキュメントのサンプルテーブルを、< Save As ... > コマンドを使いシーケンスドキュメントとしてセーブできます。データドキュメント内の総てのメソッドとキャリブレーションも、新規シーケンスドキュメントに取り込まれます。

キャリブレーションやメソッドを取り出す

データドキュメントには、それに使用したメソッドとキャリブレーションが組み込まれており、一方シーケンスドキュメントにはそれに用いたメソッドとキャリブレーションが組み込まれているか、または外部のメソッドやキャリブレーションがリンクしています。

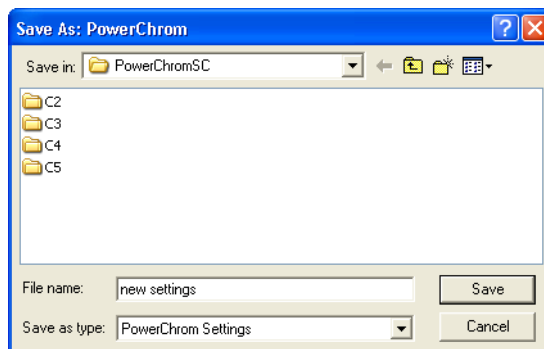
組み込まれているメソッドやキャリブレーションは、新規外部メソッドやキャリブレーションドキュメントに抽出できます。まず、データまたはシーケンスドキュメントの Windows メニューからメソッドやキャリブレーションを選択しアクセスします。メソッドかキャリブレーションウィンドウがアクティブなら、File メニューの < Save Method As... > か < Save Calibration As... > コマンドを使います。図 5-10 の様なダイアログボックスが表示します。

セッティングファイル

セッティングファイルは一般のプレファレンスやハードウェアのセッティング、メニューコンフィグレーションに使います。Edit メニューのプレファレンスサブメニューから < Save Settings... > コマンドを選択します。Save Settings As ディレクトリーダイアログボックス (図 5-11) が出ます。

図 5-11

Save Settings As ディア
ログボックス



セッティングファイルを開くと、プレファレンスでの設定やハードウェアのセッティング、メニューコンフィグレーションが新規ドキュメントの構成に使われます。セッティングファイルはワークロムのカスタムコンフィグレーションとして設定しておけば、別のユーザでも同類の分析が異なるサンプルにも実行できます。詳細は [40 ページ](#) と [141 ページ](#) を参照下さい。

プログラムアイコンかデスクトップショートカットからワークロムを始動する場合は、< Start-Up Settings > コマンド [141 ページ](#) で初期設定に組み入れることができます [5 ページ](#)。

ファイルを追加する

任意のデータドキュメントが現在開いているデータドキュメントの末端に追加できます。データドキュメントが開いている時に、File メニューから < Open Appended... > コマンドを選ぶと Open Appended ダイアログボックス [図 5-12](#) が表示します。データドキュメント、もしくは適正な形式のテキストファイルだけが追加できます [143 ページ](#)。

ランをデータドキュメントに追加すると、そのランがアクティブの時はランミニウインドウに 'Added Run' のメッセージが出ます。インテグレーションセッティングを変更するか、ピークを取り消すまで追加したランは解析できません。これは、そのランを解析するのに使われたメソッドは一緒には取り込まれない為です。必要なら Data メニューの < Manage Methods > コマンドで、そのメソッドを取り込むことができます [131 ページ](#)。

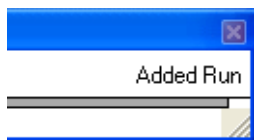
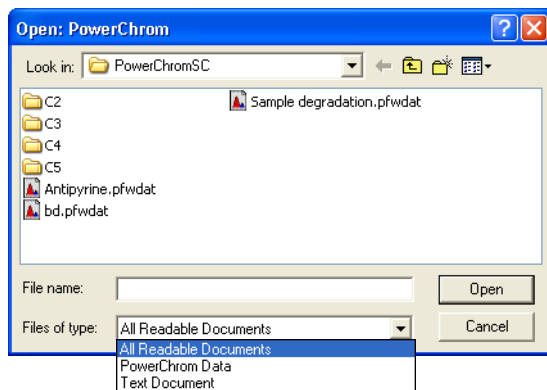


図 5-12

Open Append ディレクトリダイアログボックス



印刷

二つの主要なプリントコマンドがあります：

- ・ < Print Window... >, [106 ページ](#) はパワークロムのアクティブ（最上面）ウィンドウの内容を印刷します。
- ・ < Prin... >, [106 ページ](#) は < Print Layout... > コマンドの設定に従い各種のドキュメントやレポートを印刷します [107 ページ](#)。
様々なオプションがありますので必要なレポートが印刷できます。

印刷ページの一例を参考に [図 5-13](#) に示します。

印刷ページの設定

印刷コマンドを選択する前には、使用するプリンターに適応した紙の大きさや印刷ページなどを正しく調整しておきます。File メニューで < Choose the Page Setup... > コマンドを選び、Page Set Up ダイアログボックスを呼び出します。使用するプリンターによりダイアログボックスの表示内容は違います。プリンターの説明書を参考にして設定して下さい。< Options > ボタン（または Macintosh では Setup ポップアップメニューの < PowerChrom > コマンド）を見つけ [図 5-14](#) の様にセッティングを調整して下さい。

- ・ < Allow Color Printing > : このオプションを選ぶと、使用するプリンターに対応してカラー印刷ができます。選ばないと白黒印刷になります。システムソフトにもこのオプションが付いておれば、両者のセッティングは同じになります。カラー印刷はクロマトグラムには大変便利です。ピークを表示などが [データ表示の線とカラー, 30 ページ](#) と [ピークディスプレイ, 30 ページ](#) ダイアログボックスを使ってカラー印刷できます。プリンターによっては

図 5-13
印刷ページの例

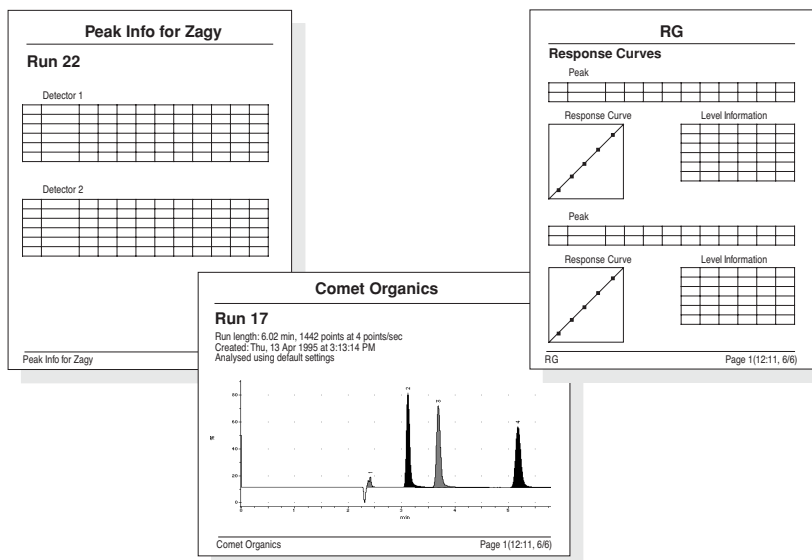


図 5-14
Page Setup オプション

- Allow Color Printing
- Use High Resolution
- Page Footers

一部の色をサポートしない場合や、モニターのディスプレイと異なるケースもありますので事前に試してみてください。

・ < Use High Resolution > 使用プリンターの最大分解能でドキュメントを印刷します。例えば、600-dpi LaserWriter を使用すると、ピークは 600 ドット/インチの分解能で印刷します。このように最大品質で印刷しますが、全てのデータポイントや区分線が最大分解能になりますので、印刷には時間が係ります。高分解能印刷でない場合は、正確にデータのポジションを印刷するには画面の 72 ドット/インチが限界です。同様にテキストは画面ポジションに対応して印刷されますので、ごまかなく印刷されるかもしれません。可能なら高い分解能で印刷して下さい。

・ < Page Footers > これを選ぶとドキュメントは全てページの下にフッターが付き、分画線とドキュメントの表題、印刷ページ、会社名（印刷したクロマトグラムソースが判る様に）を印刷します。シーケンスを使ってレポートを印刷する場合にも、フッターに日時が入ります。

ページセットアップの設定はドキュメントにセーブされ、それに派生するどのドキュメントにも適用されます。例えば、シーケンスドキュメントのページセットアップは作成されるドキュメントに適用されま

すし、それに取り込まれるメソッドやキャリブレーションにも適用されます。

ウインドウの印刷

File メニューから < Print Window... > を選ぶとアクティブウインドウ（最上面）のドキュメントが印刷できます（[図 A-1, 148 ページ](#)）。印刷されるウインドウには表題とフッターが付き、表示通りの情報が得られます。印刷されるテーブルのレイアウトは若干異なり、項目に依っては文字表示に換わる部分もあります。大きさはほぼ画面と同じで段落や項目の順番もそのままですが、画面に出ていない項目も含めテーブル全体を印刷します。

クロマトグラムは画面に表示しているものだけを印刷します（重ね合わせも含め）。画面にはみ出す程長いクロマトグラムは切り詰められます。この場合の対策は、まずクロマトグラムの時間軸を画面に対応するまで圧縮 [28 ページ](#)するか、< Print... > コマンドを使って下にクロマトグラム全体を印刷します。

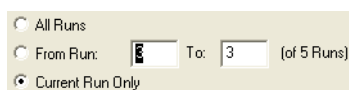
ドキュメントを印刷する

ドキュメントを印刷するには File メニューから < Print... > を選びます（[図 A-1, 148 ページ](#)）。プリンターの印刷ダイアログボックスが表示しますので、印刷するランの範囲を指定します（[図 5-15](#)）。

パワークロムには 4 形式のドキュメント（データ、キャリブレーション、メソッド、及びシーケンス）があり、それに付帯する複数のウインドウを持っています。

データドキュメントの印刷は最も複雑です。データドキュメント内の一つのランには、クロマトグラムウインドウ、ランインフォウインドウ、メソッドドキュメント、二つのキャリブレーションドキュメント（2 台の検出器を使用の場合は）、及びピークレポートテーブルが付帯しています。従って、データドキュメントの印刷する時は [プリントレイアウト, 107 ページ](#) を使ってどの部分を印刷するのかを指定する必要があります。ドキュメントの印刷は、シーケンスの作動時でも作成されるドキュメントが印刷できます。

図 5-15
印刷オプション



収録するデータを印刷する

シーケンスドキュメントを使いデータドキュメントに記録する場合は、Run Table や Run Appended ディレクトリーダイアログボックスに Print Report チェックボックスが出ます [図 5-2, 93 ページ](#)。これをマークすると、シーケンスで記録している各ランの終了時に、そのレポートを印刷します。[プリントレイアウト, 107 ページ](#)を使って印刷するウィンドウを決めて下さい。シーケンスのサンプルテーブルやシーケンスに使うメソッドやキャリブレーションは、ランの開始前に印刷されます。次に、ランに付帯するインフォメーション（クロマトグラム など）がランが終了すると印刷されます。シーケンスを調整する必要がある場合は、< Run Append... > コマンドを使ってシーケンスを停止し、メソッドなどを修正してから再開できます。

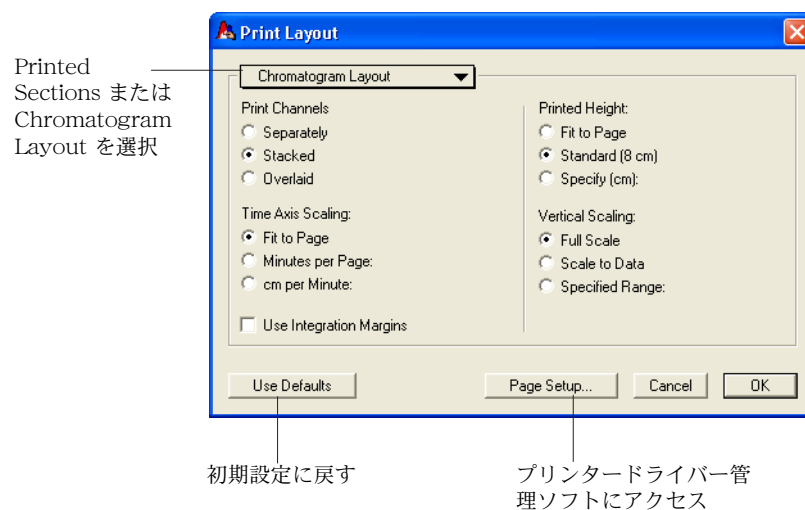
プリントレイアウト

データ、メソッドやシーケンスドキュメントの Display メニューにある < Print Layout... > コマンドを選んで、Print Layout ダイアログボックスを呼び出します [図 A-6, 150 ページ](#)。このダイアログボックスには二つの主要なオプション < Printed Sections > [図 5-16](#) と、< Chromatogram Layout > [図 5-17, 109 ページ](#)があります。

また、File メニューの < Print Window... > を使っても大部分のアクティブ（最上面）ウィンドウが素早く印刷できます。この場合は Print Layout で設定したオプションは無視されます。

図 5-16

Print Layout のダイアログボックス、PrintedSection を選択した例



セレクションの印刷

データドキュメントの指定部分だけを印刷します：

- ・ **Sample Table** : シーケンスドキュメントのサンプルテーブルは、データドキュメントの中にそれに付帯するサンプルテーブルとして作成されます。シーケンスでの記録が終わると、シーケンスドキュメントのサンプルテーブルはデータドキュメントに組み込まれます。
- ・ **Methods** : ドキュメントで使ったメソッドです。サンプルテーブルに一覧表示します。組み込まれたメソッドドキュメントでも使用されないものは印刷されません。
- ・ **Calibrations** : ドキュメントで使用されたものです。組み込まれたキャリブレーションドキュメントでも使用されないもの（サンプルテーブルで検証）は印刷されません。

シーケンスを使っている場合は、派生ファイルを含む各ランでサンプルテーブルとメソッド、及びキャリブレーションが最初に印刷されます。

ランの詳細が印刷できます：

All Runs : 通常はデータランのみ印刷されます。このオプションを選ぶと、サンプルテーブルのアクションコラムで規定したキャリブレーションランも印刷します。

- ・ **All Runs** : 通常はデータランのみ印刷されます。このオプションを選ぶと、サンプルテーブルのアクションコラムで規定したキャリブレーションランも印刷します [87 ページ](#)。
- ・ **Data Runs only** : サンプルテーブルのアクションコラムで規定したデータランを印刷します [87 ページ](#)。

その他のオプション：

- ・ **Print Chromatogram** : [クロマトグラムレイアウト, 109 ページ](#) で設定した条件に準じてクロマトグラムが印刷されます。
- ・ **Print Peak Report** : ランの Peak Report ウィンドウの表が印刷されます。これがピーク面積、ハイト、量などを要約したメインレポートウィンドウです。
- ・ **Print Run Information** : Run Info ウィンドウの Comments 欄を印刷します [図 6-19, 129 ページ](#)。Include Run Info テーブル

がアクティブの時は、そのランの記録に使用したデバイスの設定と解析に用いたインテグレーションの設定も印刷します。

Include Channels のオプション

- ・ Channel 1
- ・ Channel 2 及び
- ・ Pump B

指定したチャンネルの情報が印刷されます。

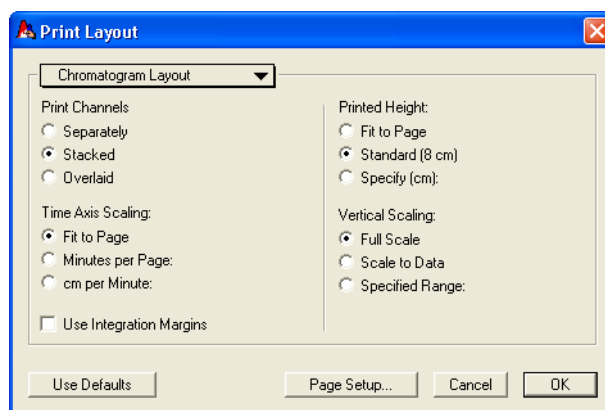
クロマトグラムレイアウト

レポートレイアウトダイアログボックス 図 5-17 では、印刷するクロマトグラムを調整します。

印刷するチャンネルの様式は、次の三つのチャンネルボタンから選びます：

- ・ **Separately** は右の欄で設定する縦軸横軸のスケールで、各チャンネルに分けてクロマトグラムとピーク情報を印刷します。
- ・ **Stacked** を選ぶとクロマトグラムウインドウに表示する様に、ダイアログボックスの右で設定した通常的时间軸とトータルハイトで各チャンネルを上下に重ねて印刷します。
- ・ **Overlaid** では 1 つの画面に重ね合わせて（縦方向に少しシフトさせて）各チャンネルを表示します。何れの場合も右の欄で印刷する軸スケールを指定します。

図 5-17
Print Layout ダイアログ
ボックスのクロマトグラム
レイアウト欄



時間軸は 3 種類のオプションでスケールを設定します：

- ・ **Fit to Page** では印刷用紙に対応したスケールになります。
- ・ **Time per Page 1** ページ当たりの時間軸を少数点分表記か時分秒表記で指定したスケールで印刷します。
- ・ **cm per Minute 1** 分当たりの長さを cm で指定して時間軸をスケールした印刷します。

Use Integration Margins を指定するとメソードの Integration の On と Off の区間だけのクロマトグラムを演算し印刷します。これを選択しなければクロマトグラム全体を印刷します。

< Channel Height > で印刷するクロマトグラムの高さを指定します：

- ・ **Fit to Page** は印刷用紙に対応させて印刷します。
- ・ **Standard (8 cm)** では高さを 8cm にして印刷します。
- ・ **Specify (cm)** で所定の欄に設定するさを入力します。

Vertical Scaling 欄でフルスケールに対するデータのスケールを設定します：

- ・ **Full Scale** では **Printed Height** 欄で設定したスペースにフルスケール表示しますので、レンジを広く取り過ぎるとピークが小さくなります。
- ・ **Scale to Data** は **Printed Height** 欄で設定したスペースに最大ピークに合わせたスケールにします。フルスケールに対しては、小さいピークでも拡大して印刷されます。
- ・ **Specified Range** ではフルスケールに対する表示割合を % で設定し **Printed Height** 欄で設定したスペースに印刷します。フルスケールに達しないピークの比較に便利です。

6

CHAPTER SIX

データの解析

この章では本プログラムが実行する解析及び、再解析について詳しく説明します。

クロマトグラムの解析ではピークのマニュアル修正に沿って、時間やベースラインの変更、ピークの追加やスキム処理、重なったピークの分割などの方法を説明します。

クロマトグラムウィンドウ [図 6-1](#) はデータドキュメントのメイン画面です (参照 [8 ページ](#) と [26 ページ](#))。Windows メニューの < Chromatogram > コマンドを使えば様々なウィンドウにアクセスできます ([図 A-4 149 ページ](#))。

クロマトグラムを解析する

マニュアルラン では ユーザ側で記録を終了し、Data メニューから < Analyse Run > を選べば解析できます。

メソッドやシーケンステーブルを使って試料を分析記録する ([92 ページ](#)) 際は、メソッドでの設定に基づいて各ランの終了後に自動的に解析します。したデータドキュメントにデータや分析情報 (通常は各ランの終了後、解析します) を収録し、関連するキャリブレーション、メソッド、シーケンス情報を複製しそれぞれのウィンドウに表示します。< Stop > ボタンでランを終了するか、何らかの変更を行ってピークにその影響を与えた場合には、Run ミニウィンドウ [図 2-12 21 ページ](#) で解析の必要を促します。

マニュアルランでもメソッドやシーケンスを使った自動ランでも、各ランが終了すると自動的にデータを解析します。生データとランの初期の物理的な条件は日付と共に記録され、変更は効きません。

図 6-1
データドキュメントの
Chromatogram ウィンドウ

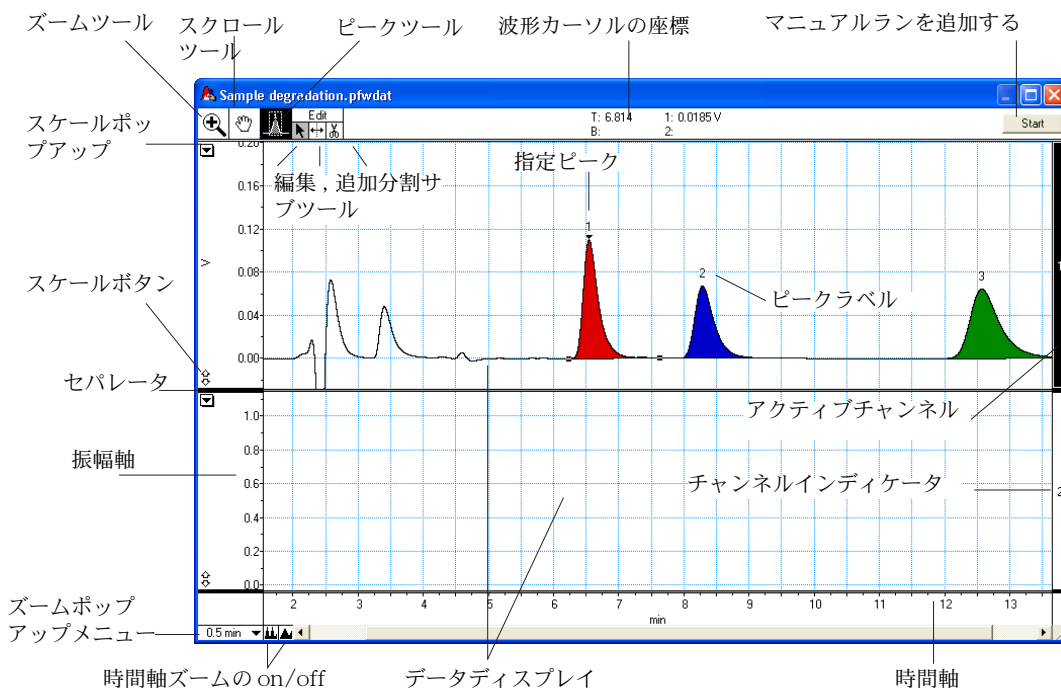
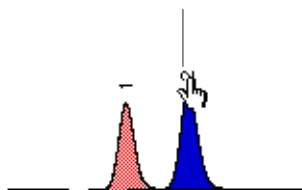


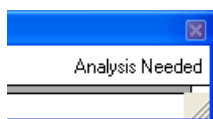
図 6-2

クロマトグラムのピークインフォメーションピークラベルは Peak Report ウィンドウと同じです

ピークラベルを押すとポップアップピークインフォメーションが出ます





Peak Number :	2
Peak Name :	Green 1
Ret. Time (min) :	3:07
End Time (min) :	3:31
Start Time (min) :	3:02
Peak Height (V) :	0.46
Norm. Height (%) :	37.33
Peak Area (V.s) :	2.08
Norm. Area (%) :	29.84
W 0.1 (min) :	0:07
Peak Asymmetry :	1.26
Column Efficiency :	11786
Peak Resolution :	3.62
Peak Type Code :	BD
Amount :	1.001




(Windows メニューの Run Info テーブルを参照 図 6-19 129 ページ)。それ以外は全てフレキシブルで随時変更できます。メソッドでのインテグレーション設定が不適切で解析データが不満なら、新規のメソッドで再解析します。

ランの解析は、Data メニューで <Analyse Run> を選びます。ドキュメントの全ランを解析するには、Data メニューで <Analyse All Runs> を選択します。この操作で、メソッドとキャリブレーションで設定したインテグレーションパラメータに沿ってランの再解析ができます (サンプルテーブルをチェックして下さい 129 ページ)。

検出したピークのパラメータは Peak Report テーブル 図 6-16 123 ページ (Windows メニューからアクセス) に収録されます。

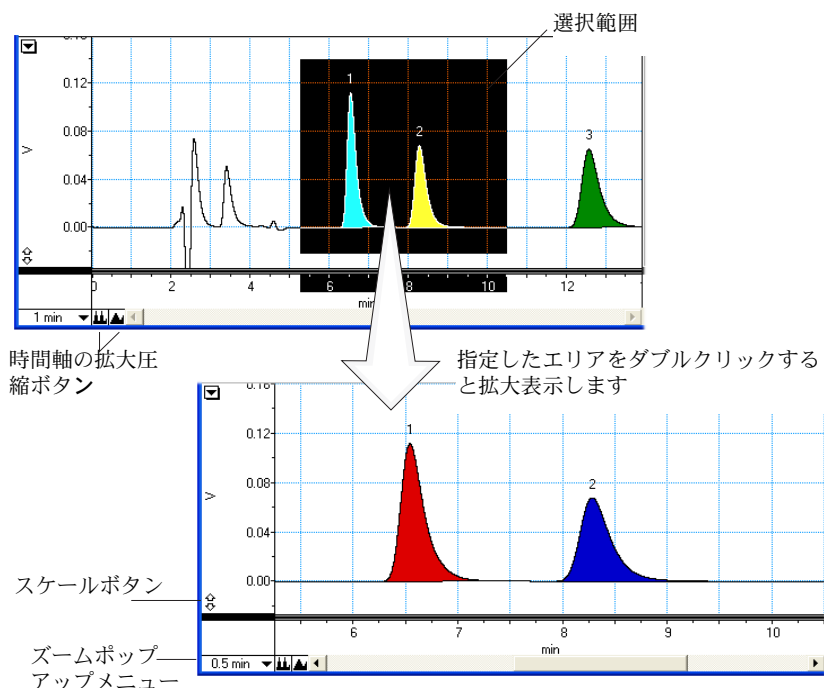
ズームツール  やピーク編集ツール  を選択している時は (図 6-1) は、クロマトグラム画面から直接特定のピーク情報に素早くアクセスできます (ポインターをピークの真上に置くとハンドマークに換わり、ピーク情報を表示します 図 6-2)。ここでのピークパラメータはポップアップリストで表示され、Peak Report ウィンドウの表記コラムに対応しています。Display メニュー から <Peak Display...> コマンド (30 ページ) を使えば、別のパラメータを選択して表示させることができます。

ズームビュー

ズームツール  を使えばクロマトグラムの指定するエリアが拡大表示できます (図 6-3)。ズームツールをクリックしエリアをドラッグして 1 チャンネル分を指定するか、時間軸の上部エリアをセレクト

して全チャンネルを指定し、ズームポップアップメニューから Zoom Selection を選択するか、又は指定エリアをダブルクリックします。






図 6-3
クロマトグラムウインドウ
内の選択範囲部の拡大例

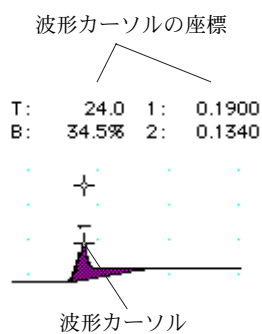


別のツールを使っている場合には、ポインターがデータディスプレイエリアにある時に Control キーを押せばズームツールが選択できます。

前のスケールに戻すには、ズームポップアップメニューから Revert Scale を選びます。

波形からデータ値を読み取る

ポインター（, , , ) がデータディスプレイエリアにある時は、波形カーソルがクロマトグラムのシグナル上に表示しデータを読み取ります（スクロールツール  を選択していない場合）。ウインドウの上段にポインターが読み取る座標の時間と振幅値を表示します [図 6-1 112 ページ](#)。ポインターがクロマトグラムをドラッグ移動するにつれて、波形カーソルもデータポイント間を移動します。






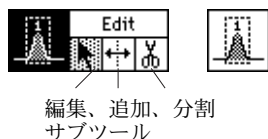
ディスプレイと分解能

クロマトグラムでは、ピークの形状と表示分解能が重要です。このプログラムのデータディスプレイは大変フレキシブルで、クロマトグラムは縦軸、横軸とも任意にサイズの変更ができます。クロマトグラムのピーク表示が期待に反して小さ過ぎたり、大き過ぎてピーク全体がウィンドウに入らない場合は、縦軸横軸のサイズを調整し適したピーク表示に変更します。例えば、シャープで幅の狭いピークを出したい時は縦軸を縮め横軸を圧縮します。

モニターに表示する画面は標準で 72ピット/インチですから、ディスプレイが小さいままだと表示分解能は良くありません。ただし、記録したデータの分解能と表示分解能とは無関係で、データは指定するサンプリング速度で忠実に記録します。ズームingを使えばデータのスムーズさが明白になり、高分解印刷でクロマトグラムデータが正確に得られます。

手動でピークを修正する

メソッドのインテグレーションパラメータを調整することで、ピークの自動検出の大抵の問題は解決しますが、最終的な判断は実験者に任されている点もあります。ワークロムには優れた手動のピーク修正機能が付いています。必要に応じてベースライン処理、スキム処理、ピークの立ち上がり・終了時間、リテンションタイムがマニュアルでも調整できます。まず、必要なエリアをズームツールで拡大し  [113 ページ](#)、次にピークツール  をクリックします。<Peaks>メニュー  [A-8 150 ページ](#)が有効表示し三種類のサブツール Edit、Add、Split が使用できます。



編集ツール,

編集ツールが初期設定です。このモードでクロマトグラム内のピーク上をクリックすると、そのピークに矩形の破線が点滅表示します。これには 3つのコントロールポイント [図 6-4](#) が出ます。即ちピークの頂点に出る逆三角印のリテンションタイムマーカ▼（検出ピークはラベルの下に）と、ピークの両端に出る 2つの四角印■のベースラインマーカが表示します。

- ・即ちピークの頂点に出る逆三角印のリテンションタイムマーカ▼（検出ピークはラベルの下に）と、
- ・ピークの両端に出る 2つの四角印■のベースラインマーカが表示します。

これらのコントロールポイントはマウスのドラッグで移動し、ピークの開始・終了、リテンションタイムを調整します（リテンションタイムは常にピークの開始・終了時の間の時間に相当します）。コントロールポイントをドラッグして移動するのに合わせて、破線がその位置をトレースし、ウィンドウの上にそのポイント値が表示します。

同じチャンネルの複数ピークをドラッグしセレクションしたり、Shift-クリックで一度に複数のピークを加えることも可能です。また、ピークグループへの従属、非従属、ピークの解消などの変更もできます。必要のないピークの消去は、ピークを選んで<Delete>キーを押せば消去します。グループ調整したピークはベースラインを共有します。Peaksメニューの<Group>と<Ungroup>コマンド 117 ページ で確かめて下さい。

図 6-4

マニュアルで編集ツールを使いピークの終了時間を調整

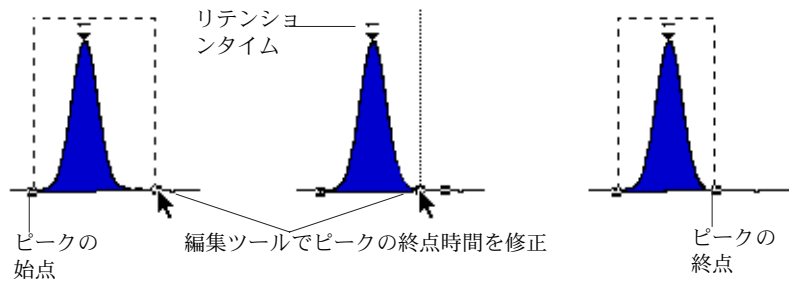


図 6-5

追加ツールでピークを追加する

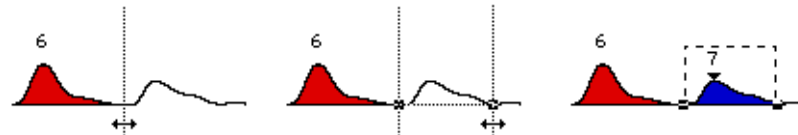


図 6-6

追加ツールでスキム処理ピークを追加

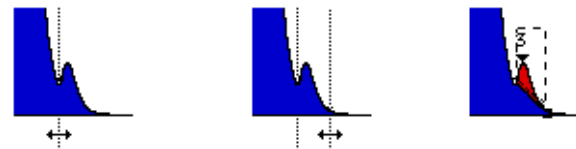
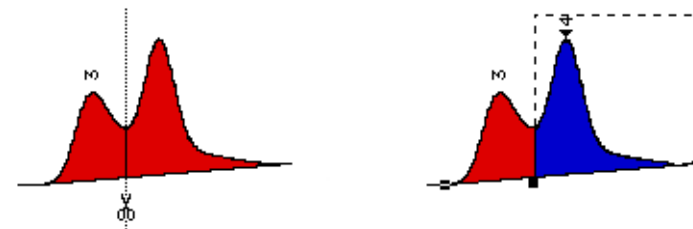


図 6-7

分割ツールでピークを分ける



追加ツール、

クロマトグラムに検出されていないピークを追加したい場合があります。これには、ピークツールの追加サブツールを選び、追加したいピークの始まりから終わりの時間までのエリアをドラッグします（[図 6-5](#)）。破線でポインターの位置は確認でき、そのポイント値がウインドウの上に出ます。コントロールポイントとピークのベースラインを示す破線がドラッグによる移動に対応して変動します。新規ピークが作成されると、ツールが編集サブツールに変わります。

追加登録したピークはスキム処理され、大きいピークの肩（立ち上がり部分の場合もあります）から接線方向にスキム処理します。追加登録したいピーク部分をドラッグするだけで、スキム処理したピークが加わります（[図 6-6](#)）。

分割ツール、

ピークを二つに分割したい場合は、ピークツールの分割サブツールを選んで分割するピークに移動し、そこをクリックします。新しいピークが出ると、ツールが編集ツールに変わります。ピークツールを選ぶとピークメニューが出ますので、指定するピークのグループ化やスキム処理オプションが利用できます。

ピークメニュー

編集、追加、分割ツールの何れかを選ぶとピークメニューが表示し、隣接ピークのグループ化やスキム処理ができます。

ピークをグループ調整する

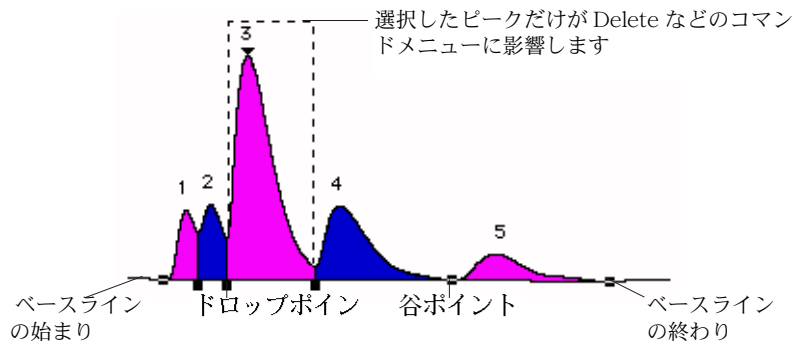
まず、編集ツールを使って対象とするピークを選びます：

- ・ < Group > コマンドで選択したピークの始まりと終わりの時間を固定します。エッジを共有する不分離ピークを解析すると、自動的にグループ化されて共通のベースラインを持ちます。
- ・ < Ungroup > コマンドは検出ピークを非グループ化し、各ピークは個別のベースラインを持ちます。

編集ツールを使ってグループ化したピークをセレクトすると、そのグループ内の全てのコントロールポイントがアクティブとなり、一度に複数の箇所を変更できます。例えば、あるピークの終了時間を変更す

図 6-8

グループ化したピークその中のピークを選択すると、ベースラインマーカと共有ベースラインが表示します



ると隣接ピーク開始時間も変わります（これはコントロールポイントを共有する為です）。

ベースラインのコントロールポイントには幾つかのタイプがあります
図 6-8 と 図 6-18 127 ページを参照：

- ・ 谷ポイント：ピン止めにしてデータをトレースします。
- ・ ドロップポイント：隣接ピークがグループ化している場合にクロマトグラムの下を固定
- ・ ベースラインの始まりと終わりのポイント：通常、グループピークの始まりと終わりをクロマトグラム上に設定
- ・ フリーポイント：クロマトグラム上やグループベースライン上を自由に移動できるポイント。ベースラインの始まり、ピークの終わりやドロップポイントも自由に移動しますが、谷ポイントは不動です。フリーポイントは□マークで表示されます（図 6-10）。

メソッドをセットアップする際に、ベースラインの構造形式（ドロップか谷ポイントか）が選択できます。その結果は Peak Report ウィンドウ 図 6-16 123 ページの Peak Type コラム 127 ページで文字コードとして記録されます。

コントロールポイントを移動すると、クロマトグラムのシグナル上にピン止めされる（谷ポイント）か、ベースラインを共有する（ドロップポイント）ように制約されます（図 6-9）。コントロールポイントはポイント間をドラッグできます。

ベースラインからコントロールポイントを解放するには、Shift - クリックしクロマトグラムのシグナルやグループベースライン 図 6-10 から放してドラッグします。フリーコントロールポイントを Shift -

図 6-9
 コントロールポイントを
 ベースラインからクロマト
 グラムシグナル上に移動
 する

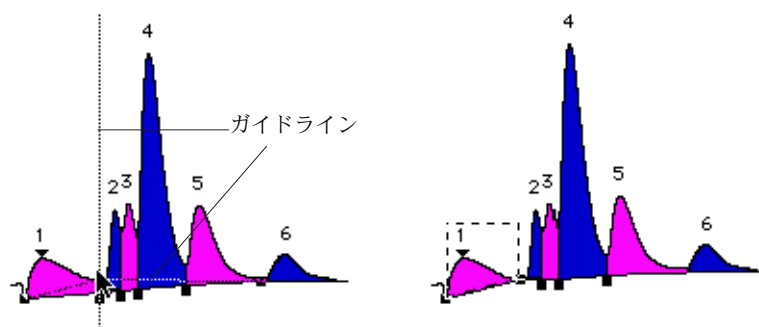
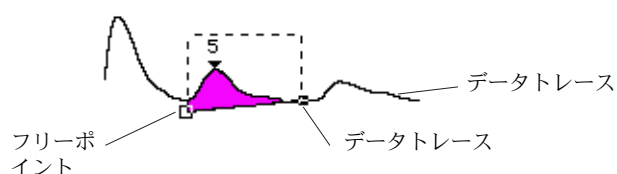


図 6-10
 フリーコントロールポイン
 トはシグナル上やシェア
 ベースラインから制約され
 ずに移動できます



クリックすると通常の不随ポイントに変わり、クロマトグラムのシグナル上に戻ります。

ピークをスキム処理する

隣接する大小のピークがくっついた部分では、小ピークを大ピークの肩から接線方向にスキム処理の方がよい場合があります。これらのスキム処理したピークは肩ピーク、又はタンジェントピークと呼ばれます。メソッドドキュメント [72 ページ](#) のエキスパートインテグレーションモードのパラメータに依ってスキム処理の程度は決まります。また、任意のランがスキム処理することも可能で、スキム処理する大小ピーク比も指定できます。Peaks メニューでスキム処理コマンドを使えば、マニュアルで任意のピークがスキム処理できます。

大きいピークから分かれている小さいピークを左にスキム処理する(テーリング処理) [図 6-11](#) には、Peaks メニューから <Skim Left> コマンドを選びます。大ピークから分かれるピークを右にスキム処理するには(リーディング処理)、Peaks メニューで <Skim Right> を選びます。スキム処理したピークをスキム解除するには、Peaks メニューで <Unskim> を選びます。ピークは下降線で分離しますが、前の親ピークに従属(グループ化)します。同じ親ピークに複数のスキム処理ピークがある場合は、総て非スキム処理されます。

図 6-11
スキム処理と非スキム処理
ピーク

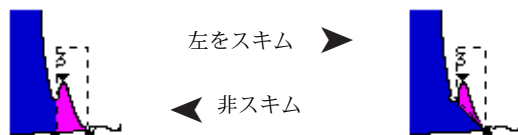
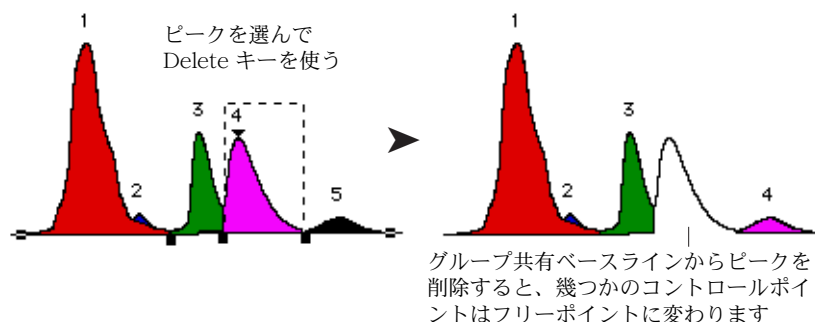


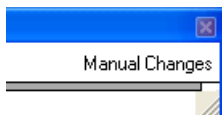
図 6-12
ピークの削除



ピークの削除と解消

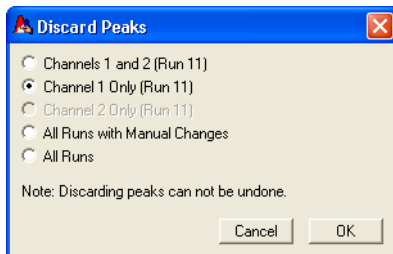
クロマトグラムの中の不必要なピークは削除できます。これには必要がないピークを選び、Edit メニューから < Delete Peaks > コマンドを選ぶか、Delete キーを入力(使用する PC によっては Delete キーが効かない場合がありますのでご注意ください)します。削除処理したピークは、データ上ではピークとしては扱われません 図 6-12。

メソッドでのパラメータを再調整し再解析すれば良好な結果が得られる筈ですが、場合によってはマニュアルでピークを追加したり、不用意なピークを削除する必要があるかも知れません。



アクティブプランに手動でピークを変更すると、ランミニウインドウにメッセージが出ます。Analysing Runs (Analysing Run コマンドを使って)によりマニュアルで変更したピークの再解析を実行します。従って、正確に調整したピークやベースラインなどが消失する危険性はありません。また、Data メニューで < Discard Peaks... > コマンドを選べば 図 A-5 150 ページ)、元の生データ表示に戻ります。ダイアログボックス 図 6-13 に Discard Peaks メニューが出ますので、該当するオプションを選んで下さい。ピークを無効にした後で、必要なメソッドやキャリブレーションドキュメントのインテグレーションパラメータで再解析できます。

図 6-13
Discard Peaks ダイアログ
ボックス



外部ランデータ

現行のドキュメントのランと比較する為、別のデータドキュメントのランもロードできます（同類のデータランを含むファイルから）。別のファイルのランをロードするには、Data メニューで < External Run... > を選ぶと、Load External Run ダイアログボックスが出来ます 図 6-14。この外部ランはドキュメント内では特別に扱われます。

以前に保存したデータファイルのランだけが取り込めます。外部ランは一つしかロードできません。それ以上ロードすると前のものと置き換わります。

外部ランをドキュメントに読み込むと現行ランの最前部に入り、ランミニウィンドウ 図 2-12 21 ページ には Ex と表示されたランボタンが出来ます。また、Go To Run ダイアログボックス 図 2-13 21 ページ にも 'X' と出ますのでこのランにアクセスできます。

この外部ランデータはクロマトの比較だけで、解析はできません。手動によりピークの編集はできます。従って外部ランがアクティブの時は、< Analyse Run > コマンドはダイム表示となり使用できませんし、< Analyse All Runs > も無効ですし、サンプルテーブルのドキュ

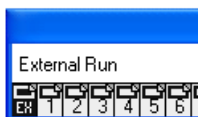
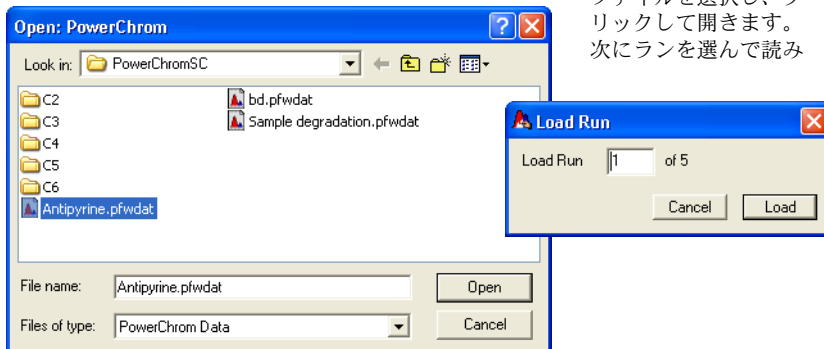


図 6-14
Load External Run デイレ
クトリーダイアログボック
ス



メントにも表示しません。削除は通常通りに行います。そのランを削除してドキュメントにペーストして戻せば、通常通り追加ランとして扱われます。

外部ランをコピーして元のドキュメントにペーストして戻すと、そのランは通常のランになり再解析もできます。別のデータドキュメントから複数のランを取り込むには File メニュー [96 ページ](#) の < Open Append... > コマンドを使います [A-1 148 ページ](#)。

インジェクションタイムの設定

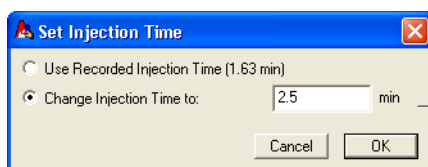
クロマトグラムの時間は全て、分析する試料をカラムにインジェクトしてからの経過時間で表されます。

しかし時にはインジェクト信号が誤った時間に入ってしまい、修正する必要がある場合があります。このような場合は、そのランの終了後にインジェクションタイムの修正が行えます。

Data メニュー [A-5 150 ページ](#)) で < Set Injection Time > コマンドを選び、Set Injection Time ダイアログボックス [6-15](#) を呼び出します。

設定したインジェクションタイムはランの開始からの時間になります。入力する時間は H:M:S か分表示です。変更を実行すると、そのランのクロマトグラム情報とディスプレイは更新します。インジェクションタイムは-にもできますが、この場合はインジェクションの後で記録は始まります。

図 6-15
Set Injection Time ダイア
ログボックス



インジェクションシグナル
(記録はその後で開始) のタイ
ムをここに示します。イン
ジェクションシグナが無けれ
ば 'none' にします

ピークレポート

Windows メニューからデータドキュメントのピークレポートウィンドウ [図 6-16](#) を呼び出せば [図 A-4 149 ページ](#)、アクティブデータランで検出したピークに関する情報が表示します。ピークレポートウィンドウは標準的なテーブル形式で、本プログラムのテーブルが持つ機能や性質を持ち [テーブルの表記設定, 36 ページ](#)、コラム表題や表記幅の変更などができます。

ピークレポートウィンドウは検出器（チャンネル）毎に分かれ、それぞれ別個に設定します。各ディテクター欄は二つの主要項目に分けています。

表記欄に表示する情報の大部分は誘導され演算処理されたもので、それらを直接修正することはできません。しかしクロマトグラムの変更、例えば、マニュアルでのピーク修正や新パラメータを使った再解析などには対応し表示値は変わります。

ピークレポートのセッティング

ピークレポートウィンドウの中の標準化（Normalisation）の基準や、どの高さでピーク幅を決めるかなどは必要に応じて変更できます。こういった表示情報の変更には、Display メニューから <Peak Report Settings...> コマンドを選びます。Peak Report Setting ダイアログボックスが出ます（[図 6-17](#)）。

どのピークの高さでピーク幅を決定するかを **Measure Width at** : 欄に%表示で入力します。0 ~ 100%の範囲で 0.1%刻みで設定できます。一般には 50%か 10%です。

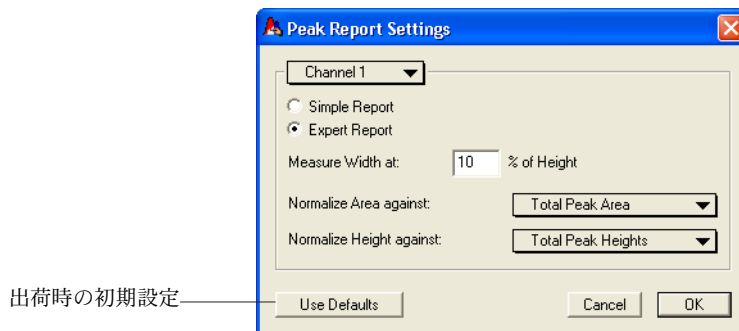
図 6-16
データドキュメントの
Peak Report ウィンドウ

Channel 1												
Peak	Fill	Name	tR (min)	tS (min)	tE (min)	H (V)	HNorm	A (V.s)	ANorm	W0.1	Asym	Effic
1		Ch	6.54	6.23	7.63	0.11	45.64	1.80	34.10	0.50	2.06	3112
2		ECH	8.28	7.92	9.42	0.07	27.75	1.40	26.62	0.63	1.87	3177
3		Ach	12.57	11.99	13.92	0.06	26.61	2.07	39.28	0.98	1.93	3014
						0.24	100.00	5.27	100.00			

Channel 2												
Peak	tS (min)	tE (min)	H (V)	HNorm	A (V.s)	ANorm	W0.1	Asym	Efficiency	Res	Type	Amount
1	6.23	7.63	0.11	45.64	1.80	34.10	0.50	2.06	3112			
2	7.92	9.42	0.07	27.75	1.40	26.62	0.63	1.87	3177	3.29	BB	
3	11.99	13.92	0.06	26.61	2.07	39.28	0.98	1.93	3014	5.70	BB	
												0.000

図 6-17

Peak Report Settings ダイアログボックス



Normalise Area against : ポップアップメニューにピーク面積を最大ピークに対する比率表示にするか、総面積に対する比率にするかを選択します。同様に、**Normalise Height** : ポップアップメニューでピーク高さを最高ピーク高さに対する比率で表示するか、トータルピークの高さに対する比率にするかを選択します。

Peak Report テーブルに表示するコラムは次の選択で決まります :

- ・ **Simple Report** では Peak Number 、 Fill Pattern 、 Peak Name 、 Retention Time 、 Height 、 Area 及び Amount
- ・ **Expert Report** では Start Time 、 End Time 、 Normalized Height 、 Normalized Area 、 Width 、 Asymmetry 、 Efficiency 、 Resolution 、 及び Peak Type

これらのレイアウトは Peak Report ウィンドウ内で調整できます ([テーブルの表記設定, 36 ページ](#))。

ピークレポートレイアウト

メソッドやシーケンスドキュメントの Display メニューから < Peak Report Layout > コマンドを使って、Peak Report Layout ダイアログボックスを呼び出しピークレポートウィンドウをレイアウトします ([ピークレポートレイアウト, 78 ページ](#))。

ピークレポートテーブル

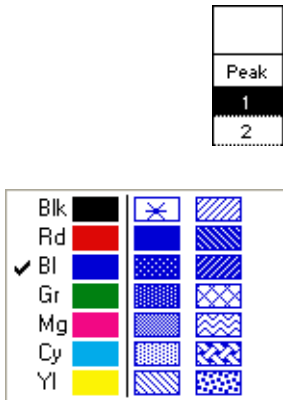
ピークレポートで様々なピーク情報を表にします。コラムは塗りつぶし模様やピーク名以外は編集できません。セルに ##### マークが出る場合はコラム幅が狭すぎて表記できない事を示しています ([図 3-14 36 ページ](#))。各エントリーの総計は各コラムの下に表示します : ピーク高さ、エリア、標準高さ、標準エリア、量。

ピーク番号 (Peak Number, Peak, #)

左端の Peak 項にはリテンションタイム順に番号付けされたピークの一覧が出ます。この段落は修正が効きません。また、行全体の選択や修正にはこの項を使って行の選択をします。ある行を削除すると、クロマトグラムのその番号に対応するピークも削除されます (120 ページ)。

塗りつぶし模様 (Fill Pattern, Fill)

Fill はクロマトグラムをディスプレイするピークの表示カラーと模様を指します。そのピークがキャリブレーションテーブル 62 ページのピークに対応する場合は、そのテーブルで指定した Fill で表示します。初期設定以外の設定では Colour & Pattern ポップアップメニュー 図 3-3 29 ページ Peak Display ダイアログボックス (30 ページと同じ) から選択します。



Automatic の設定にした場合、または未知ピークは初期設定のピーク表示になります。

ピーク名 (Peak Name, Name)

この項目のピークに対応する化合物の名称を入力します。そのピークがキャリブレーションテーブルのピークに対応するものであれば、自動的にその名称が表示されます (必要なら上書きできます)。必要無ければ空欄にします。

リテンションタイム (Retention Time, Ret. Time, t_R)

このコラムにはリテンションタイムを調整できるコントロールポイントがあり、通常は検出ピークが最大振幅値を示す点を、インジェクションタイムからの時間で表示します (図 6-4 116 ページ)。コントロールポイントは手動によるピーク編集で調整します (115 ページ)。ここのリテンションタイム (又は溶出時間) は、キャリブレーションテーブルで設定した化合物の同定に使います。同じサンプルテーブルでキャリブレーションランとしてマークされたランが、同定したピークのリテンションタイムを更新します。

スタートタイム (Peak Start Time, Start Time, t_S)

このコラムにはスタートタイムのベースラインコントロールポイントがあり、ピークの開始をインジェクションタイムからの時間で表します (図 6-4 116 ページ)。マニュアルでのピーク修正 (115 ページ) で変更します。

エンドタイム (Peak End Time, End Time, t_E)

このコラムもコントロールポイントがあり、ピークの終了をインジェ

クシオンタイムからの時間で表示します ([図 6-4 116 ページ](#))。この時間もマニュアルで変更します ([115 ページ](#))。

ハイト (Peak Height, Height, H)

検出したピークのリテンションタイムでのピークの高さを表示します。単位は振幅フルスケールの % 表示です。

Normalized Height (Normalized Height, Norm. Height, H_{Norm})

検出ピークの次のピークハイトに対する比率です :、又はトータルピークハイトに対する比率 (Peak Info Settings ダイアログボックスで指定) で表わしますが、単位はありません。:

- ・クロマトグラム内の最大ピークハイト
- ・クロマトグラム内の全ピークハイトの総計
- ・そのグループピーク団の内部標準ピークハイト

[ピークレポートのセッティング, 123 ページ](#) 参照。

エリア (Peak Area, Area, A)

検出ピークの面積を表示します。単位は振幅軸に時間を掛けたもので (mV.s では mV で記録されたシグナル、% では振幅軸がフルスケール % の場合です) 表します。

Normalized Area (Normalized Area, Norm. Area, A_{Norm})

検出したピーク面積を次の面積に対する比率で表します :

- ・クロマトグラム内の最大ピークハイトの面積
- ・クロマトグラム内の全ピーク面積の総計

そのグループピーク団の内部標準ピーク面積

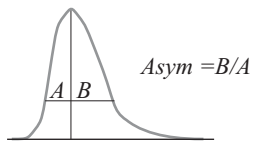
[ピークレポートのセッティング, 123 ページ](#) 参照。

Width (Width at X% Height, Width at X%, $W_{0.X}$)

検出したピークの幅を、Peak Info Settings ダイアログボックスで指定した高さで読み取った値で表わします ([ピークレポートのセッティング, 123 ページ](#))。ここでの高さの設定はメソッド [70 ページ](#) と [89 ページ](#) のシーケンスでも設定しておけます。ピークがその高さの垂直線で分離されている場合は、この欄は空白になります。ピーク幅は本来一定の筈です。そうでない場合は、温度ドリフトか分離カラムが不安定の為です。

Asymmetry (Peak Asymmetry, Asymmetry, Asym)

ピーク幅を決定した高さでの対称度を表示するセルです。対象度とはピーク幅を決定したピーク高さでのリテンションタイムからピークの右端とリテンションタイムからピークの左端との間の時間の比率です。有効値が決まらない場合はこのセルは空欄になります。



Efficiency (Column Efficiency, Efficiency, Effic)

カラム効率をピークの広がり、ピーク幅、リテンションタイム、対称度により決定します。詳細は [page 168](#) を参照下さい。

Resolution (Peak Resolution, Resolution, Res)

検出ピークの分解能を表わします。分解能はピーク幅とリテンションタイムに基づき、peak-to-peak の分離を読み取ります。従って、最初のピークのこの欄は空白になります。詳細は [169 ページ](#) を参照下さい。

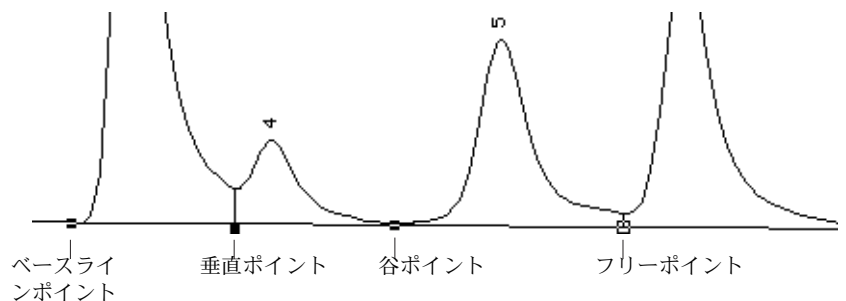
Peak Type (Peak Type Code, Peak Type, Type)

ピークベースラインの構成、即ちピークの開始と終了の決定方法を示すセルです。文字コード B, V, D, F, S で Baseline, Valley, Dropline, Free 及び Skimmed を表します ([図 6-18](#))。これはその点でのコントロールポイントにも対応しています ([図 6-4 116 ページ](#))。ピークのベースラインは二文字で表し (例、BB ピークはベースライン上で開始終了ポイントが決定されたもの)、前に S が付けばそれはスキム処理したピークを意味します (SBB)。

ベースラインポイントと谷ポイントは両方ともクロマトグラムのシグナル上に付きますが、谷ポイントは両ピークの接地点にしか付きません。フリーポイントは手動ピーク編集で生じるポイントです ([115 ページ](#))。

図 6-18

グループ化ピークのベースラインとコントロールポイント



Amount (Amount, Amt)

キャリブレーションドキュメントに基づいて同定したピークに対応する化合物を定量し表示します。数値の単位はキャリブレーションで入力したもの（濃度、重量等）と同じになります（[キャリブレーションの単位, 61 ページ](#)）。キャリブレーションでは解析の既知量（ユーザが規定）をこのセルに入力します。

このカラムの数値は（単位名ではなく）単位変換処理に関係します。それは単位変換でそのデータは校正され、解析する量はその検量関数で処理されるためです。

キャリブレーションにピークインフォを使う

データドキュメントのピークレポートウィンドウの情報をコピーして、キャリブレーションドキュメントのキャリブレーションテーブルウィンドウにペーストできます（[図 4-8 59 ページ](#)）。これを利用すればキャリブレーションの第一濃度レベルの設定が簡単です。それ以外のレベルは直接入力します。シーケンスを使えば実際のデータの情報と置き換わります。

ピークレポートウィンドウで必要な段落を選択し Data メニューから < New Calibration > コマンドメニューを選べば、新しく作成したキャリブレーションにはそのピーク情報が含まれます。

必要のないものは削除できます。

ランのインフォメーション

ランインフォウインドウ [図 6-19](#) はデータドキュメントの Windows メニューから呼び出せます（[図 A-4 149 ページ](#)）。アクティブランの一般的な情報を表示し、記録の方法や解析の方法が判ります。ランインフォウインドウはメソッドテーブルに対応しますが（[図 4-15 72 ページ](#)）、表記部分に < Method Time > が追加されています。このセルは編集できません。このデータはキャリブレーションで処理されて解析されるためです。段落の配列、リネーム、隠すことは通常のコラムの様に行えます（[テーブルの表記設定, 36 ページ](#)）。

このウィンドウは三つの主要な段落に分かれています：

- ・ コメント欄には記録方法と分析方法を表示します。これらのセッティングは変更できません。コメント欄には最大 32,000 文字のコメントが入力できます。GLP に適応する様に、記録条件がコメント欄に恒久的に記録されます。記録の長さ、サンプリング数、サンプリング速度、記録日時を記録します。また、使用したメ

ソッド、シーケンス、自動又はマニュアルランの別、データソースなども表示します。

・デバイスコントロール欄はそのランに使用したオリジナルメソッドのセッティングを表示します。

・インテグレートコントロールパラメータがここに出ます。編集はできませんが、オリジナルのメソッドドキュメント（データドキュメントの Windows メニューから呼び出せます）のパラメータは編集可能です。また、新しいインテグレートパラメータを使った第二のメソッド（データドキュメントのサンプルテーブル 図 6-20）の < Method Used > コラムから）も選択し解析できます。インテグレーション解析で使ったメソッドもデータの記録に使用したメソッドも、両方コメント欄に一覧表示します。

Method Time (Method Time, Time_M, t_M)

この項目はデータドキュメントのランインフォウインドウだけに表示します。メソッドドキュメントのメソッドテーブルには有りません。元のメソッドに示す記録時のイベント時間を表します。この時間は通常 Inject Time 欄の時間と一致していますが、インジェクトの遅れやポーズを使用した場合などでは変わります。

サンプルテーブル

サンプルテーブル 図 6-20 にはデータドキュメントを構成するランの詳細が記録されており、データドキュメントの Windows メニューから (図 A-4 149 ページ) 呼び出します。記録に用いたシーケンス、メソッド、マニュアルラン、あるいはそれらの組み合わせものなどの情報が載っています。データを再解析する際には、このテーブルでメ

図 6-19
Data ドキュメントの Run
Info ウィンドウ

インジェク
ションポイン
トからの時間

表示させるパラ
メータに用いる検
出器を選ぶ

コメント欄

Entry	t (min)	TimeM (min)	B (%)	Digital Output 1	Comment	On	Th
1	-0.27	0.00		OpenZow	Inject		2.0%
2	-0.24	0.00			Waiting for inject		
3	0.00					Off	
4	0.01	0.00			Inject detected		
5	4.00					On	
6	9.00	9.00			Stop		

メソッドタイム デバイスコント
ロール欄

インテグレーション
コントロール欄

ソッドやキャリブレーションの変更をします。また、各ランのアクション（目的）や使用したメソッドなどが一覧できます。

このテーブルカラムは通常の表記形式と同様に再配列、リネーム、隠すことができます（[テーブルの表記設定](#), 36 ページ）。また、テーブルの表示レイアウトは Repeat を除いて修正が効きます。

サンプルテーブル [図 6-20](#) は三つの段落から成っています：

- ・ コメント段落はオリジナルシーケンスドキュメントのコメントを含め、最大 32,000 文字まで入力できます。
- ・ サンプルコントロール欄段落カラムはシーケンスドキュメントのサンプルテーブルとカラムと関連しています（[85 ページ](#)）；
- ・ キャリブレーション段落のカラムもシーケンスドキュメントのサンプルテーブルとカラムと関連しています（[85 ページ](#)）。

シーケンスを使ってデータドキュメントが作成されると、二つのドキュメントのサンプルテーブルは関連します。データドキュメントにはサンプルテーブルに一覧表示する総てのキャリブレーションとメソッドの複製が組み込まれます。

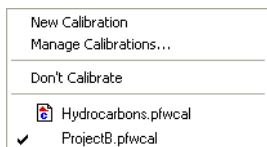
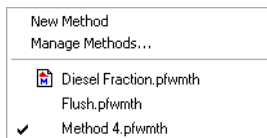
図 6-20
Deta ドキュメントの
Sample Table ウィンドウ

サンプルコントロール段落 キャリブレーション段落 コメント段落

Sample Control					Calibration Control		
Runs	Name	Rpts	Method Used	Action	Calibration Used	Level	Averaging
1	Cal 0 mg	1	Diesel Fraction.pfwmth	Calibration	Demo Calibration	00 mg	Replace
2	Cal 01 mg	1	Diesel Fraction.pfwmth	Calibration	Demo Calibration (1)	01 mg	Replace
3	Cal 5 mg	1	Diesel Fraction.pfwmth	Calibration	Demo Calibration (2)	05 mg	Replace
4	Cal 10 mg	1	Diesel Fraction.pfwmth	Calibration	Demo Calibration (3)	10 mg	Replace
5	Unknown	1	Diesel Fraction.pfwmth	Data Run	Don't Calibrate		

Method Used (Method Used, Method)

ここのセルでメソッドポップアップメニューにアクセス、ランを解析するメソッドを選んで表記します。メニューの詳細は [81 ページ](#) を参照下さい。このポップアップメニューにはデフォルト設定をはじめデータドキュメントに含まれている総てのメソッド名が一覧表示します。ここで別のメソッドを選び、新しいメソッドのインテグレーションパラメータを導入してデータを再解析できます。但し、データを収録した際に用いたメソッドに関するランインフォテーブルの記録には



影響を与えません。このセルには二つの特異的なエントリーが含まれています：'Default Method' と 'Default Settings' で ([132 ページ](#)) で説明します。

Calibration Used (Calibration Used, Calibration)

このセルはキャリブレーションポップアップメニューを持ち、使用する検出器に対応するキャリブレーションを選び表記します。2 台の検出器を使う場合は、各検出器毎にそのキャリブレーションを指定します。このポップアップメニュー ([81 ページ](#)) にはデータドキュメントに含まれている全キャリブレーション、及び 'Don't Calibrate' が入っています ([87 ページ](#))。

必要なら別のキャリブレーションを選んでランの再解析ができます。

< Method Used > と < Calibration Used > ポップアップメニューのコマンドにはデータドキュメントからもアクセスできます ([図 A-5 150 ページ](#))。

メソッドとキャリブレーションの管理

データドキュメントの Data メニュー [図 A-5 150 ページ](#) には次のコマンドがあります：

- ・ < New Method >
- ・ < New Calibration >
- ・ < Manage Methods... >
- ・ < Manage Calibrations... >

データドキュメントの Managing methods と Managing calibration はシーケンスドキュメントの Sequence メニューとほぼ同じ様に機能します ([80 ページ](#))。

組み込まれているメソッドやキャリブレーションの名前が Windows メニューに一覧表示し ([図 A-4 149 ページ](#))、選択すれば開けます。ドキュメントに 3 種類以上の内部メソッドやキャリブレーションが在る場合は、メソッドやキャリブレーションのサブメニューに表示します。

キーショットカットも使用できます。現行ランで使ったメソッドは Ctrl+= (Macintosh では ⌘=) で開きますし、キャリブレーションは Ctrl+hyphen (.) (Macintosh では ⌘-hyphen(.)) で開きます。

デフォルトメソッドとデフォルトセッティング


ここのセルには二つの特異的なエントリーが含まれています：'Default Method' と 'Default Settings' で、サンプルテーブルの < Method Used > セルに表示します。

'Default Settings' のインテグレーションパラメータは、オリジナルメソッドが無効なランや、別のデータドキュメントからペーストして取り込んだランに適用されます（メソッドはランでは複製されませんが、< Manage Methods... > コマンドを使えば取り込めます（[81 ページ](#)）。そうであればデフォルトセッティングでランの再解析をします。Default Settings の表記は常に斜体で、別のメソッドと区別され、編集はできません。

マニュアルサンプリングで記録した場合には、特定のメソッドが無ければデフォルトメソッドが自動的に作成され、それで解析されます。デフォルトメソッドがデータドキュメントに作成されると、インテグレーションパラメータにその Default Settings が適用されます。デフォルトメソッドを開けば、他のメソッドの様にそのインテグレーションパラメータは編集ができます。

解析を更新する

設定時間より前に手動で記録を終了しない限り、記録する総てのランは自動的に解析されます。解析結果に不満足なら、以下の操作で再解析が簡単に行えます：

- ・ランの解析に使う付帯メソッドのインテグレーションパラメータを編集します（[71 ページ](#)）。Windows メニューから現行のランの解析に使用したメソッドを開くか、< Ctrl+= >（Macintosh では =）のショートカットキーでそのメソッドを呼び出します。そのテーブルを修正し、Data メニューで < Analyse Run > を選びます。
- ・ランの解析に使う付帯キャリブレーションのパラメータを編集するか（[58 ページ](#)）、下で説明する別のバージョンのキャリブレーションを使って解析の不具合を補正します。
- ・サンプルテーブルで新規メソッド [130 ページ](#) を選びます。そのデバイスコントロールの設定はサンプリング時に使われたもの以外は無効で修正できません。データの収録に使われたデバイスコントロールの記録パラメータは、ランインフォウィンドウにそのまま残ります。

・ サンプルテーブルで新規キャリブレーション (130 ページ) を選びます。マニュアルサンプリングや個々のメソッドで記録したランには、初めは付帯するキャリブレーションは持ちません。引き続きデータを解析するにはサンプルテーブルの < Calibration Used > コラムにアクセスします。また、' Don't Calibrate ' を選べばサンプルテーブルのキャリブレーションの適用されず、ピークは検出しますが定量分析はされません。

・ クロマトグラムのピークを手動で編集する (115 ページ)。

キャリブレーションのバージョン

シーケンスを使って記録が終了すると、記録されたデータドキュメントには元のキャリブレーションがコピーされて含まれ、各キャリブレーションランに対応して更新されたキャリブレーションのバージョンが書き込まれます。

例えばシーケンスドキュメントで、最初のランはキャリブレーションランとし標準液を使ってピークエリアの情報を収録します。このランが終了すると二種類のキャリブレーションバージョンができます：ピーク面積 / ハイト情報を持たない (又は古い) オリジナルバージョンと、ピーク面積 / ハイト情報が更新された新しいバージョン。検量線の決定に幾つかの濃度レベルが必要なら、その分のキャリブレーションランが必要で、その各ランには新規バージョンのキャリブレーションテーブルを持つことになります。

次のキャリブレーションランが作成されるまで、キャリブレーションのそのバージョンが、各ランのピークの同定と定量に用いられます。バージョンはキャリブレーションランのラン番号と一致しています。この番号はサンプルテーブルの < Calibration Used > コラムにキャリブレーション名の後に表示します。例えば、MyCalibration、MyCalibration (1)、MyCalibration (2)、MyCalibration (7)、(図 6-21) など。オリジナルのキャリブレーションにはバージョン番号は付きません。

オリジナルのキャリブレーションは編集でき、新バージョンに更新されます。キャリブレーションのシーケンスバージョンは直接は編集できません。それ以外のバージョンは測定中にオリジナルを変換した結果作成されたもので、編集はできません。ポップアップメニューに載っている斜体表記のものは、未だランの再解析が行なわれていない事を表します。斜体表記が空白のテーブルは、無効を意味します。

図 6-21

キャリブレーションのバージョン

The screenshot shows a software window titled "Calibration 'Demo Calibration' of Antipyrine.pfwdat". At the top, there are fields for "Area Ratio:" and "Amount:" with a "Version" dropdown menu set to "Before All Runs". Below this is a "Peak" dropdown menu set to "1: drug". The main area is a "Sample Table" with columns for "Runs", "Sample Control" (Name, Rpts, Method Used), and "Calibration Control" (Calibration Used). The table contains 5 rows of data. To the right of the table is a "バージョンポップアップメニュー" (Version Pop-up Menu) with options: "Before All Runs", "After Run 1", "After Run 2", "After Run 3", and "After Run 4". An arrow points from the "バージョン" (Version) label to the "バージョンポップアップメニュー".

Runs	Sample Control			Calibration Control
	Name	Rpts	Method Used	Calibration Used
1	Cal 0 mg	1	Demo...thod	Demo Calibration
2	Cal 5 mg	1	Demo...thod	Demo Calibration (1)
3	Cal 10 mg	1	Demo...thod	Demo Calibration (2)
4	Cal 01 mg	1	Demo...thod	Demo Calibration (3)
5	Unknown	1	Demo...thod	Demo Calibration (4)

外部でリンクしているキャリブレーションドキュメント (58 ページ) は、シーケンスを使えば更新されます。従って、リンクしたキャリブレーションドキュメントは、そのシーケンスで記録したデータドキュメント内の最後のバージョンと常に一致します。シーケンスドキュメントに付帯するキャリブレーションは、そのシーケンスを使っても更新されず、そのデータドキュメント内のオリジナルのキャリブレーションバージョンと一致します。

また、データドキュメントにあるキャリブレーションならどのバージョンでも取り出せます。そのキャリブレーションウィンドウを開き Version ポップアップメニュー 図 6-21 からそのバージョンを選び、File メニューから < Save Calibration As... > を選択すれば取り出せます。

キャリブレーションを編集したい場合、例えば、リテンションのトレランスが狭すぎて、または広すぎてデータランではピークが正しく同定されないケースなどに修正できます。

その他の調整

メソッドの設定が不十分でピーク検出が不都合な場合は、マニュアルで調整できます。手動によるピーク検出に関する変更 (115 ページ) の殆どは Peak Report ウィンドウ (123 ページ) に直ちに反映されますが、定量値は消去します。定量計算はピークのマッチングに影響されるので再解析されるまで演算されません。

オリジナルのメソッドやキャリブレーションを消去したり変更したラン情報は Peak Report に大部分は残りますが、定量値は再解析されるまでは無効です。

別のファイルから取り込んだランを追加すると、新しいメソッドを解析する為に登録するか、そのランのピークを消去してランを変更しない限り、ピークやピーク情報は保存されます。

追加したランを再解析するとピーク情報は保存される旨の警告が出ます。 < Reanalyse All Runs > コマンドメニューを使うと、追加したランは無視され再解析はされません。

ピークをキャリブレーションするには4つの方法があります：ピーク面積による、ピーク高さによる、面積比による、ピーク高さ比による (59 ページ) です。データランを解析した後でモードを変更すると、そのキャリブレーションに係わる総ての結果は無効となり、再解析する必要があります。

シーケンスを取り出す

File メニューから < Save As... > を選び、シーケンスドキュメントとしてデータドキュメントのサンプルテーブルを取り出すことができます (フォーマットオプションとして < PowerChrom Sequence > を選びます)。データドキュメント内の総てのメソッドやキャリブレーションは新規シーケンスドキュメント内にも組み込まれます。また、データドキュメントのサンプルテーブルウインドウの段落をコピーし、シーケンスドキュメントのサンプルテーブルにペーストできますが (80 ページ)、メソッドやキャリブレーションは移動できません。

メソッドやキャリブレーションは、Sequence メニューの < Manage Methods ... > や < Manage Calibrations... > (81 ページ) を使って (必要なら) 取り込みます。

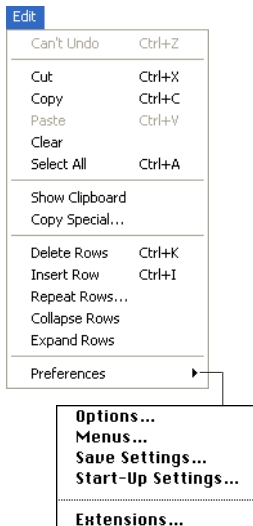
7

CHAPTER SEVEN

カスタマイズと自動化

パワークロムプログラムにはカスタマイズや自動化機能を幅広くサポートするツールが含まれており、便利で使い易くなっています。各種のコントロール項目、メニューやコマンドメニューをロックしたり、隠したり、変更できます。

この章では、プレファレンス、カスタマイズ、及び自動化のオプションについて詳しく説明します。



プレファレンス

Edit > Preferences サブメニューには次のコマンドがあります：

- ・ < Options... >
- ・ < Data Buffering... > [139 ページ](#)
- ・ < Menus... > [140 ページ](#)
- ・ < Save Settings... > [141 ページ](#)
- ・ < Start-Up Settings... > [141 ページ](#)
- ・ < Hardware Start-Up... > [143 ページ](#)

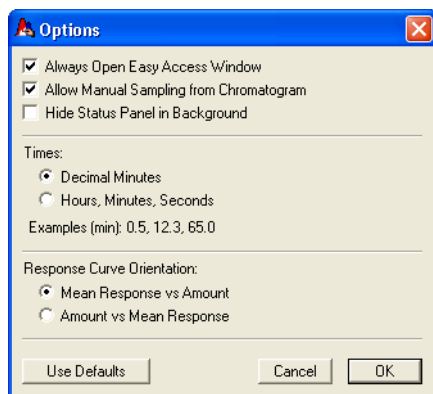
これらのコマンドを使って、コントロールやメニュー、コマンドメニュー（及びキー操作）をロックしたり、隠すことができます。

< Options... >

< Options... > サブメニューを選ぶと、Options ダイアログボックス [図 7-1](#) が出ますので、次の設定ができます。

- ・ **Always Open Easy Access Window** これを選択してパワークロムプログラムを立ち上げると、Easy Access ウィンドウがいつも出ます。これを選択しないと画面に出ませんが、Window メニューから Easy Access ウィンドウは呼び出せます（[図 A-4, 149 ページ](#)）。
- ・ **Allow Manual Sampling from Chromatogram** クロマトグラムウィンドウに < Start ボタン > が出ます。これをクリックするとデータドキュメントでマニュアルランが始動します。

図 7-1
Options ダイアログボックス



- ・ **Hide Status Panel in Background** これを選択すると Status Panel がバックグラウンド表示に変わり、別のアプリケーションがアクティブ画面になります。一方、Status Panel は画面に表示しますので記録の経過は観察できます。
- ・ **Times** 時間の表記形式を設定します。Decimal Minutes で、時間表示は小数点の分単位になります（例、73.35）。Hours , Minutes , Seconds に変更すると、時 : 分 : 秒単位の表示に変わります（例、1:13:21）。ここでの設定がプログラム全体の時間表示に反映します。
- ・ **Response Curve Orientation** キャリブレーションドキュメントの検量線が、量に対する面積表示（Area vs Amount）にするのか、面積に対する量表示にするのかを決めるオプションです。

データバッファリング

パワークロムはサンプリング中は、コンピュータのハードディスク上の暫定ファイルに 30 秒毎にデータを書き込みます。停電やシステムクラッシュなどシステムに誤謬が生じて、プログラムを再始動すればデータは復帰します。

Windows コンピュータでは初期設定で暫定ファイルは、コンピュータのハードディスク上の 'PowerChrom Temporary Items' サブディレクトリーに付きます。プログラムの要請に応じてこのファイルは作成され削除されます。Edit > Preferences > Data Buffering コマンドで暫定ファイルのロケーションは変更できます。

Macintosh コンピュータでは初期設定で暫定ファイルは、コンピュータのハードディスク上のシステムフォルダーにあるプレファレンスフォルダーの 'PowerChrom Temporary Items' フォルダーにあります。プログラムの要請に応じてこのファイルは作成され削除されます。Edit > Preferences > Data Buffering コマンドで暫定ファイルのロケーションは変更できます。

データバッファリングの機能は停止できますが、推奨できません。この場合は、データはコンピュータの RAM（または仮想メモリー）に順次収録されます。停電やシステムクラッシュでこれらのデータは消失してしまいます。

メニュー

メニュー（File、Edit、Macros、Windows など）及びそのコマンドは初期設定から変更できます。変更は < Menue... > サブメニューコマンドを選び Menue ダイアログボックス 図 7-2 から行います。メニューやコマンドメニューをロックしたり隠すと、第三者の操作を制限できセットアップも簡素化できます。特に教育実習として学生向けに使う場合は、必要な機能だけを表示させて重要なデータなどが故意に変更されるのを防ぐのに利用します。File メニューの < Save Method > / < Calibration As... > コマンドは < Save Method As > / < Save Calibration As... > にも影響しま

ドキュメントに表示しないメニューでも、ここではコマンドメニューの総てのセレクションが有効で編集できます。

キーボードショートカット


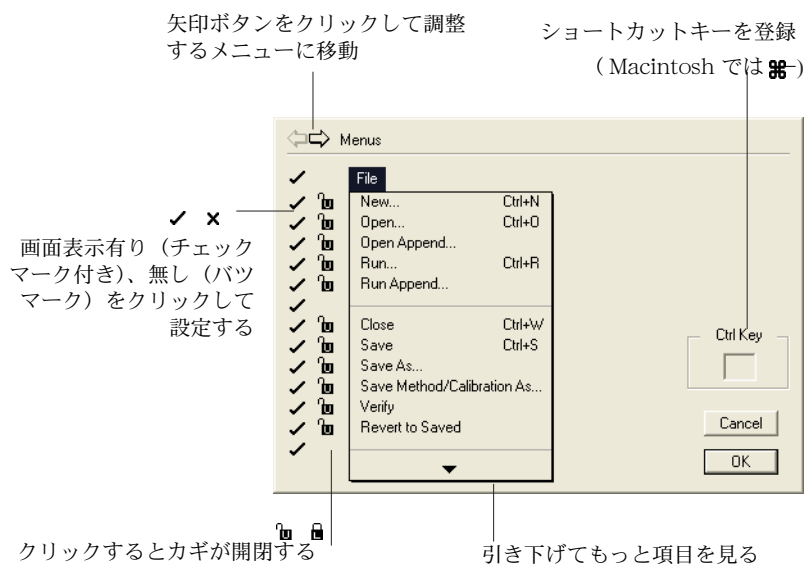
コマンドメニューに対するキーボードショートカット (152 ページ) は Menus ダイアログボックス 図 7-2 で設定したり変更できます。コマンドメニューをクリックし選択します：ダイアログボックスの Ctrl キー欄（Macintosh では  キー欄）がアクティブ表示に変わります。エントリーボックスに一文字、または数字を入れてそのキーをショートカットキーとして登録します。仮に Ctrl キー欄に 5 を入

図 7-2
Menus ダイアログボックス



力すると (Macintosh では Cmd キー欄)、そのコマンドのショートカット

キーは Ctrl+5 (Macintosh では ⌘-5) になります。そのコマンドメニューに既にショートカットキーが登録されていれば、エントリーボックスで変更するか削除するかを聞いてきます。

入力した文字が別の場所で登録されている場合は、前の設定に上書きされます。



Settings

セッティングファイルのアイコン

セッティングをセーブする

セッティングファイルの作成ができます。標準プレファレンスやハードウェアセッティング、メニュー構成を、予め設定したセッティングファイルとしてメモリーにロードします (ウインドウサイズ、表記欄のレイアウト、表示カラーや模様などのデータ表示に関するディスプレイセッティングは個々のドキュメントに収録されますので、セッティングファイルやプレファレンスにはセーブできません。通常これらのセッティングはステーションナリドキュメントにセーブします)。

< Save Settings... > を選び Save As ダイアログボックスを呼び出し、作成するセッティングファイルの名称を登録します。< OK > をクリックすると、現行のプレファレンス、ハードウェアセッティング、及びメニュー構成がそのファイルにセーブされます。そのファイルを立ち上げるか、Open コマンドメニューを使ってそのファイルを開くと、そのセッティングがロードされ同じ環境になります。

始動セッティング

新たな初期メニュー構成を保存し、パワークロムを立ち上げる時の始動セッティングとして使うことができます。これらのセッティングを削除したい場合は、新しいものと入れ替えるか 'PowerChrom StartUp' ファイルを削除します。Windows コンピュータの場合は使用している Windows のバージョンに依ってこのファイルのロケーションが様々なので、ファイル検索で見つけて下さい。Macintosh では System / Preferences フォルダーに 'PowerChrom StartUp' ファイルがあります。次にパワークロムを立ち上げると、新たなスタートアップファイルが作成されます。

セッティングファイルを使ってパワークロムを始動するか、パワークロムからセッティングファイルを開くと、前の始動セッティングは削られ、そのセッティングファイルと置き換わります。

緊急なアクセス

プレファレンスコマンド（または Edit メニュー全体を）をロックしたりメニュー自体を隠して、メニュープレファレンスが変更できませんので、これを解除できる機能が必要です。これにはショートカットキーの、Ctrl+¥（Ctrl キーを押しながら ¥ キーを押す、Macintosh では ⌘-¥）で Show Dialog Box のダイアログボックス [図 7-3](#) にアクセスします。

、ファイルを保護する為にアクセスさせずにするには、Command-/（スラッシュ記号は疑問符マークキーと同じです）を入力して Show Dialog Box を出します。

< Menu Edito... > ボタンをクリックすると Menus ダイアログボックス [図 7-2](#) にアクセスします。

< Start Up Setting... > ボタンをクリックすると、プログラムの始動時にそのセティングが現行のメニューコンフィグレーションとしてセーブされます。

< Save Setting... > ボタンをクリックして Save As ダイアログボックスを立ち上げると、標準プレファレンス、ハードウェアセティング、及びメニュー構成の一式がセーブできます。このオプションはそのファイルを保存する時にメニュー項目がロックされていたり、隠されているセッティングファイルをセーブする場合に便利です。

図 7-3

Show Dialog Boxd

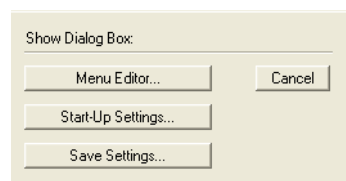
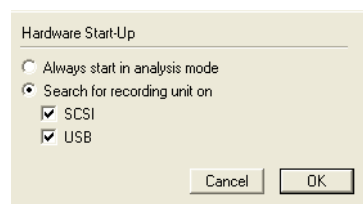


図 7-4

Hardware Start-Up ダイアログボックス



ハードウェアのスタートアップ

このコマンドで Hardware Start-Up ダイアログボックス [図 7-4](#) にアクセスし、パワークロムのソフトウェアを解析モード専用にする設定に変更できます ([図 1-2, 5 ページ](#))。パワークロムを解析専用にする場合に便利です。また、ハードウェアとの接続認知を SCSI か USB インターフェースからか、又は両方かの設定も行います。最新のパワークロムは USB 接続だけです。

ファイルを変換する

パワークロムのプログラムにはテキストファイルから適正なフォーマットでデータを取り込んだり、テキストファイルとしてデータを取り出しできる機能が付いています。

< Open > 及び < Open Append > ディレクトリーダイアログボックス ([図 2-7, 13 ページ](#) と [図 5-12, 104 ページ](#)) の 'Files of type' ポップアップメニューの中からオープンするファイル形式を選びます。同様に、Save As ダイアログボックス ([図 5-10, 102 ページ](#)) の 'Save as type' ポップアップメニューを使って取り出すファイル形式が選べます。

テキストファイルを開く

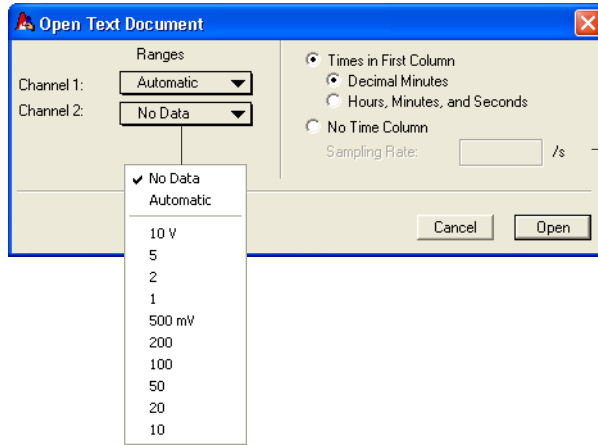
File メニューの < Open... > 及び < Open Append... > コマンドからテキストファイルを読み込みます ([図 7-5](#))。

テキストファイルはデータドキュメントのランに変換できます。一行分のデータはタブ切りか、スペース切りでリターン文字で終了 ([図 7-6](#)) します。時間値を含まないデータは各行の第一列に載ります。数値が記載されていない空白行や時間値が減少している行は、その前のランが終了して新規ランの始まりと認識しデータは読み込まれません。

テキストファイルは正しくフォーマットされているものとして処理されます。正しくないと空白なドキュメントか、極めて短いランの繰り返しとなって変換されてしまいます。三列分のデータしか読み込みませんので、それ以上あってもそれ以外は無視され変換されません。従ってポンプデータなどはデータドキュメントにはロードできません。

図 7-5

オープンテキストファイル・フォーマットファイルダイアログボックス



I テキストファイルの時間項目がない場合はこの欄にサンプリング速度を入力して下さい。

図 7-6

テキストファイルの例：パワークロムで読み込みます

時間データ	Detector 1 のデータ		Detector 2 のデータ
	3.0957	0.6086	0.2474
	3.0999	0.6748	0.2782
ランの中断	3.1041	0.7308	0.3160
	3.1083	0.7749	0.3601
	3.1124	0.8043	0.4105
	3.1166	0.8190	0.4662

テキストファイルを変換するには、Open ディレクトリーダイアログボックスか Open Append ダイアログボックスで変換するファイルを選び、< Open >、又は < Append > ボタンをクリックして Open Text Document ダイアログボックスを呼び出します。

Ranges. このポップアップメニューで、呼び込んだデータを記録した時の入力レンジを入力します。通常は Detector 1 にロードし、Detector 2 は空欄のままにします。ポップアップメニューから入力レンジを選ぶと、それをファイルに呼び込み調整します。総てのランをその入力レンジで処理します。

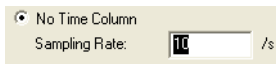
ポップアップメニューで ' Automatic ' を選ぶと、プログラムは最大の振幅値に対して各ランを検証し、各ラン毎に最適な入力レンジで処理します。この場合は電圧データ (V) として処理します (1mV は 0.001V とします)。振幅値が大きすぎて通常のレンジから外れておれば、0-1 レンジの無次元の数値として処理します。又、データドキュメントの振幅軸には最初は単位は付きません。後で単位変換して付けることは可能です。

mV の単位で入力レンジを登録されていても、そのファイルの総てのデータが 1.0 以上の場合には V の単位で扱われます。総て 1.0 以下のデータであれば mV として扱います。

科学的な表記法の数値（例 3.456E-2）は移出できません。

Times in First Column. これを選ぶと、そのファイルのデータ列はそれを記録した時間として処理します。下のボタンで時間表示が分単位か時間単位（hms）かを指定します。時間表示を時分秒にした場合はテキストを読み込む際には秒単位を正確に読み取ります。

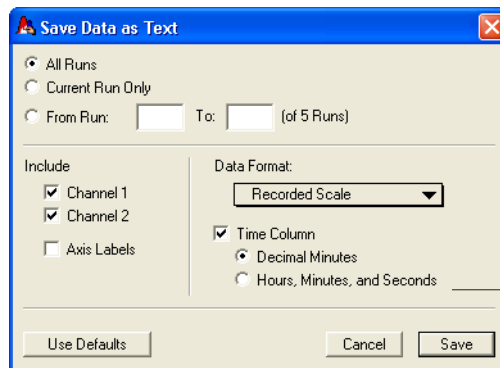
No Time Column. これを選ぶと、そのデータには時間値が含まれていないと見なして処理します。この場合は記録したサンプリング速度を必ずサンプル数 / 秒の単位で下の入力欄に入れて下さい。最大 1000 / 秒まで対応します。取り込んだデータがそれより速くサンプリングされても、1000 / 秒で処理されます。



テキストファイルを保存する

ファイルメニューの < Save As... > コマンドを使えば、記録したクロマトグラムをテキストファイルとして取り出すことができます（[テキストファイルを開く, 143 ページ](#)）。この場合は Save as type ポップアップメニューで < Text Document > を選択して下さい。ファイルフォーマットは次のセクションで説明する様に、[図 7-19](#) の Save Data as Text ダイアログボックス [図 7-7](#) で設定するオプションによって変わります。

図 7-7
テキストファイル形式で
ファイルを保存する時のオ
プション



Percentage Scale
✓ Recorded Scale
Converted Units
Volts

ポップアップメニューからデータの単位を選択すると保存されます

記録したポイントデータはチャンネル毎にタブ切りの一行分に表示します。'Times' を選ぶと最初のコラム列にはデータポイントを記録した時間を表示します。'Time Format' で時間表示のモードを指定します。記録した Detector チャンネルを選びます。'Axis Labels' を選択すると、各ランの一行目に軸の表示単位が出ます。軸ラベルは単位に括弧が付きます。

テキストファイルがセーブ先のデータドキュメントよりかなり大きく、ラン数も多いとセーブもそれに準じて遅くなりますので注意して下さい。

通常は全データファイルを呼び出す必要は少ないと思われます(クロマトグラム数もせいぜい数十で数百にはならないでしょう)。一つか二つのクロマトグラムをスプレッドシートや画像プログラムに呼び込む場合は、ファイルメニューの < Copy Special... > から 'Copy as Text' オプションを使って下さい([コピースペシャル, 99 ページ](#))。少ない数のクロマトグラムを扱う場合には、プログラム間のデータのやりとりはコピー&ペーストの方がかなり速く処理できます。

解析モード

パワークロムの名称に 'Analysis' の接頭語を付けることも可能です:

Analysis PowerChrom

これでパワークロムは自動的に解析モードで始動します([5 ページ](#) と [143 ページ](#))。この場合はパワークロムのハードウェアの認知はしませんので、ハードウェアを接続してなくても警告メッセージはでません。

A

メニューとショートカット
キー

メニュー

このプログラムにはいつも次の四つのメニューが出ます：ファイル File、エディット Edit、マクロ Macro、ウィンドウズ Windows。情報入力を伴うメニューの Data、Calibration、Method、Sequence は、ウィンドウメニューの右側に表示します。Display と Peak メニューはその右に表示しサブメニューはそれに対応する場所に表示します（例えば、データドキュメントの Sample Table ウィンドウがアクティブの時は Sequence に）。コマンドメニューの次に (...) 印のあるコマンドには、設定すべきダイアログボックスが表示しキー操作機能があればその右に出ます。

コマンドメニューに依ってはアクティブウィンドウや設定内容により、変更した表示しなかったり、無効表示になります（表 A-1, 152 ページ）。ここに示すメニューは標準のメニュー設定の場合で、メニューをカスタマイズしたりマクロで増やしたりするとメニューの内容は異なってきます。チェックマーク (✓) はそのコマンドメニューがアクティブなことを示唆します。表 A-1 から A-13 にメニューとそのショートカットが表してあります。また、Macintosh をお使いなら、<Ctrl> キーの代わりにコマンド <⌘> キーを使います。

図 A-1

File メニュー (92 ページ
～ 106 ページ)

注: コマンドキーを表わす
⌘ - は Macintosh 用で、
Windows PC では <Ctrl-
> キーに相当します

File		
New...	Ctrl+N	新規プログラムドキュメントの作成
Open...	Ctrl+O	既存ドキュメントを開く
Open Append...		別のドキュメントを読み込んで追加する
Run...	Ctrl+R	データを記録する
Run Append...		記録するデータを現行ドキュメントに追
Close	Ctrl+W	ドキュメントを閉じる
Save	Ctrl+S	ドキュメントを保存する
Save As...		別名でドキュメントを保存する
Save Method As...		内部メソッドをドキュメントとして保存
Save Calibration As ...		内部キャリブレーションを外部ファイルとして保存
Verify		不整合なドキュメントをチェック
Revert to Saved		最後に保存したドキュメントに戻す
Page Setup...		印刷用紙を設定
Print...	Ctrl+P	ドキュメントを印刷
Print Window...		アクティブウィンドウを印刷
Exit	Ctrl+Q	プログラムを終了

図 A-2

Edit メニュー (98 ページ
～ 101 ページ)

Edit		
Undo	Ctrl+Z	取り消し (可能なら)
Cut	Ctrl+X	クリップボードに選択したデータをカット
Copy	Ctrl+C	クリップボードに選択したデータをコピー
Paste	Ctrl+V	選択範囲をペースト
Clear		選択範囲を削除
Select All	Ctrl+A	すべてを選択
Show Clipboard		クリップボードの内容を表示
Copy Special...		クリップボードに文字や図形をコピー
Export Peaks		クリップボードにピークデータを複写
Delete Rows	Ctrl+K	指定行を削除
Insert Rows	Ctrl+I	表示行を挿入
Repeat Rows...		表示行を複製 (シーケンスのみ)
Collapse Rows		段落を圧縮
Expand Rows		段落の圧縮を解除
Preferences		プレファレンス

図 A-3

Preferences サブメニュー (138 ページ)、Edit メニューからアクセス可。

Options...
Data Buffering...
Menus...
Save Settings...
Start-Up Settings...
Hardware Start-Up...

機能や設定を修正
バッファファイルのロケーション明示
プログラムメニューを修正
Setting File に設定を保存
始動設定として保存
解析モードで常時開くオプション

図 A-4

Windows メニューの 4 つのドキュメント形

Windows メニューのコマンドは、オープンしているキャリブレーション、メソッド、シーケンス、データドキュメントに依り異なります。また、それに含まれるメソッドやキャリブレーションの名称によっても変わります。

Calibration	Method	Sequence	Data
Windows Easy Access Ctrl+E Clipboard <hr/> <input checked="" type="checkbox"/> Test1:Calibration Test2:Method Test3:Sequence Test4:Data <hr/> <input checked="" type="checkbox"/> Calibration Table	Windows Easy Access Ctrl+E Clipboard <hr/> Test1:Calibration <input checked="" type="checkbox"/> Test2:Method Test3:Sequence Test4:Data <hr/> <input checked="" type="checkbox"/> Method Table	Windows Easy Access Ctrl+E Clipboard <hr/> Test1:Calibration Test2:Method <input checked="" type="checkbox"/> Test3:Sequence Test4:Data <hr/> <input checked="" type="checkbox"/> Sample Table Ctrl+4 Method 1 Method 2 Calibration 1 Calibration 2	Windows Easy Access Ctrl+E Clipboard <hr/> Test1:Calibration Test2:Method Test3:Sequence <input checked="" type="checkbox"/> Test4:Data <hr/> <input checked="" type="checkbox"/> Chromatogram Ctrl+1 Peak Report Ctrl+2 Run Info Ctrl+3 Sample Table Ctrl+4 Method 1 Method 2 Ctrl+= Calibration 1 Calibration 2 Ctrl+-

Windows メニューの下段には利用できるウィンドウ名が表示し、中段の表示するアクティブドキュメントには (✓) マークが入ります。

図 A-5

データドキュメントがアクティブな時にアクセスできる Data メニュー

Data	
Analyze <u>R</u> un Ctrl+L	現行ランのピークを解析
Analyze <u>A</u> ll Runs	全ランのピークを解析
<u>D</u> iscard Peaks...	検出ピークの解消

New <u>M</u> ethod	新規内部メソッドを作成
New <u>C</u> alibration	規内部キャリブレーションを作成
Manage <u>M</u> ethods...	メソッドの管理
Manage <u>C</u> alibrations...	キャリブレーションの管理

<u>L</u> oad External Run...	別ファイルのランを呼び出す
<u>S</u> et Injection Time...	インジェクションタイムの設定
<u>U</u> nits Conversion...	表示単位を設定

図 A-6

データ、メソッド、シーケンスドキュメントがアクティブな時にアクセスできる Display メニュー

Display	
Print Layout...	印刷するドキュメントを調整
Peak Report Layout...	ピークレポートを調整 (メソッドで)
Peak Report Settings...	ピーク幅、比率の設定

Axis Labels & Scales...	時間軸と振幅軸の表示を設定
Lines & Colors...	クロマトグラムの表示を設定
Peak Display...	ピーク表示の方法を設定

<input checked="" type="checkbox"/> Display Peaks	クロマトグラムにピークを表示
<input checked="" type="checkbox"/> Fill Peaks	検出ピークの表示カラーや模様を指定

図 A-7

Overlay メニュー (33 ページ ~ 36 ページ)、データドキュメントがアクティブな時に有効

Overlay	
<input checked="" type="checkbox"/> Overlay <u>O</u> ff	全オーバーレイ表示を解除
Overlay <u>C</u> hannels	現行ランのチャンネルをオーバーレイ
Overlay <u>R</u> uns	現行ランをオーバーレイ
Overlay Runs <u>3</u> -D	三次元オーバーレイ

<u>S</u> how All Runs	全ランをオーバーレイ
<u>H</u> ide All Runs	ランのオーバーレイを解除

図 A-8

Peaks メニュー (117 ページ ~ 120 ページ)、クロマトグラムウィンドウがアクティブの時に有効

Peaks	
<u>G</u> roup Ctrl+G	J ピークを従属化
<u>U</u> ngroup Ctrl+U	従属ピークを解消

Skim from <u>L</u> eft	子ピークの左側をスキム処理 (テーリング処理)
Skim from <u>R</u> ight	子ピークの右側をスキム処理 (ディールディング処理)
Unskim	スキム処理を解消

図 A-9

Calibration メニュー (59
ページ ~ 69 ページ)
キャリブレーションドキュ
メントがアクティブの時有効

Calibration

Manage Levels...
<input checked="" type="checkbox"/> Peak Area Peak Height Peak Area Ratio Peak Height Ratio
Sample Averaging...
Calibration Units...

濃度レベル (点数) を管理

ピーク面積で解析
ピークハイトで解析
ピーク面積比で解析
ピークハイトの比で解析

新規キャリブレーションを平均処理
単位の設定

図 A-10

Method メニュー (72
ページ ~ 75 ページ)、
メソッドドキュメントがア
クティブの時有効

Method

Hardware Settings...
Inject Settings...
Units Conversion...
Method Units...
<input checked="" type="checkbox"/> Simple Integration Expert Integration

検出器からの入力信号を調整
記録の開始時間を設
検出器からの入力信号の表示単位を設 定
ピーク検出、解析用に単位を設

ピーク検出項目の簡易設定
ピーク検出項目の詳細設

図 A-11

Sequence メニュー (80
ページ ~ 85 ページ)、
シーケンスドキュメントが
アクティブの時に有効

Sequence

New Method
New Calibration
Manage Methods...
Manage Calibrations...

新規内部メソッドの作成
新規内部キャリブレーションの作成
メソッドの管理
キャリブレーションの管理

表 A-1

ショートカットキーのリスト

ショートカットキー

表 A-1 に示すショートカットキーは出荷前の初期設定のリストです。プログラムをカスタマイズしている場合は、リスト通り操作すると誤動作します。また、追加したり別のキーで登録されているかも知れませんのでご注意ください。

Windows	Macintosh	機 能
Ctrl+A	⌘ - A	総てを選択
Ctrl+C	⌘ - C	ラン、又は選択範囲をクリックボードへコピー
Ctrl+E	⌘ - E	Eassy Access ウィンドウを開く
Ctrl+G	⌘ - G	選択ピークをグループ化する
Ctrl+I	⌘ - I	行を挿入
Ctrl+J	⌘ - J	インジェクト
Ctrl+K	⌘ - K	選択行を削除
Ctrl+L	⌘ - L	アアクティブランを分析
Ctrl+N	⌘ - N	新規ドキュメント
Ctrl+O	⌘ - O	ドキュメントを開く
Ctrl+P	⌘ - P	ドキュメントを印刷
Ctrl+Q	⌘ - Q	プログラムを印刷
Ctrl+R	⌘ - R	メソッドやシーケンスを使う
Ctrl+S	⌘ - S	ドキュメントを保存
Ctrl+U	⌘ - U	選択ピークのグループ化を解除
Ctrl+V	⌘ - V	ペースト
Ctrl+W	⌘ - W	アクティブウィンドウを閉じる
Ctrl+X	⌘ - X	クリップボードのデータを消去
Ctrl+Z	⌘ - Z	不履行 / 再試行
Ctrl+1	⌘ - 1	クロマトグラムウィンドウを開く
Ctrl+2	⌘ - 2	Peak Report ウィンドウを開く
Ctrl+3	⌘ - 3	Run Info ウィンドウを開く
Ctrl+4	⌘ - 4	Sample Table ウィンドウを開く
Ctrl+ =	⌘ - =	分析に使うメソッドを開く
Ctrl+ -	⌘ - -	分析に使うキャリブレーションを開く
Ctrl+ .	⌘ - .	マクロの作動を停止
Delete	Delete	選択データ、選択ピーク、選択ランを消去

隣接ランへの移動は Ctrl+ ← や、Ctrl+ → (Macintosh では ⌘ ← や ⌘ →) でも行えます。

ダイアログボックスでは：

- ・ タブキーは挿入ポイントを次の入力欄への移動に使用します
- ・ エンターやリターンキーは <OK> ボタンをクリックするのと同じ機能を行います
- ・ <Ctrl-ピリオド> (Macintosh では ⌘.), <Esc> キーは <Cancel> ボタンをクリックするのと同じ機能を行います。

上記以外のショートカットキーについてはこのマニュアルの本文で触れてあります。

B

A P P E N D I X B

トラブルシューティング

技術サポート

パワークロムの作動チェックは厳密に行こなっていますが、時には問題や不測の事態が生ずることがあります。ここでは考えられるトラブルの一覧と、その解決法を解説します。パワークロムの操作上の問題点で、このユーザーズガイドで説明されていない部分や技術的なサポートが必要な場合は、販売代理店にお問い合わせ下さい。

アップルメニュー (🍏) で <About PowerChrom> (Macintosh) か、<Help> メニュー (Windows PC) を選んで下さい。終了したらこのダイアログボックス 図 B-1 の任意の場所をクリックすれば閉じます。

問い合わせ先及び代理店情報


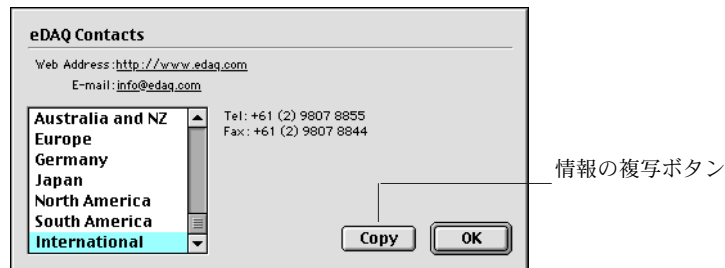
パワークロムの正規問い合わせ先情報が必要な時は、 をクリックして eDAQ コンタクト情報 図 B-2 ダイアログボックスを呼び出します。<Copy> ボタンでこのインフォメーションは複写できます。

図 B-1
About PowerChrom ダイアログボックス




図 B-2

eDAQ コンタクト先情報



システム構成の情報

コンピュータアイコンのボタン  をクリックし (図 B-1) About This Computer ダイアログボックスを呼び出します (図 B-3 と 図 B-4)。

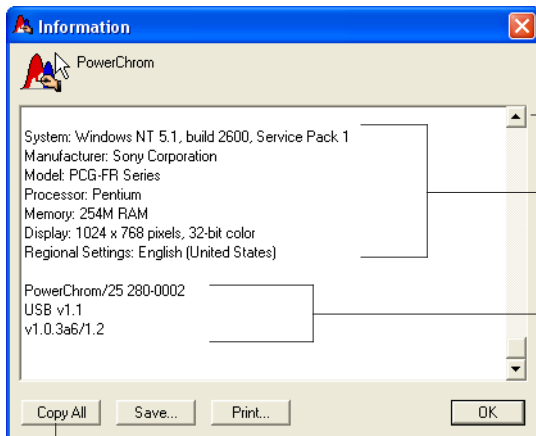
このダイアログボックスから使用中のワークロムのバージョンと、コンピュータハードウェアのシステム構成の情報が判ります。一般的に、ご使用のハードの構成が分かれば問題の解決の手助けになります。< Print... > ボタンでこの情報を印刷して販売代理店にファックスするか、クリップボードに複写し eDAQ の販売代理店まで e-mail して下さい。トラブルの際の解決に大変便利となります。

お願い

ユーザからのコメントを歓迎します。トラブル処理に直ぐには役に立たないかも知れませんが、パワーラブについての使用している方からのアドバイスはご意見は大変参考になります。可能なら今後のバージョンアップに採用してまいります。お気づきの点が有りましたら取り扱い店までご遠慮なくお申し出下さい。

図 B-3

Windows PC の 'About This Computer'



ソフトウェアバージョン情報

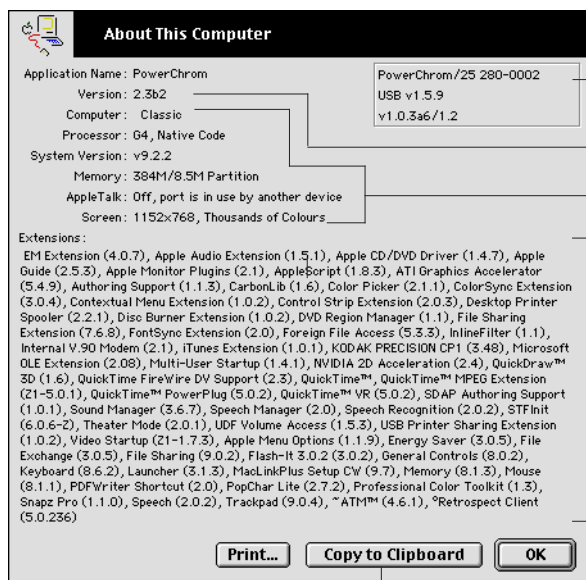
コンピュータ情報

ハードウェア情報のスクロール一覧

このダイアログボックスコピーしてペーストし e-mail で送信下さい

図 B-4

Macintosh の 'About This Computer'



ハードウェアのモデル情報

ソフトウェアバージョン情報

Macintosh の情報

Macintosh のシステム拡張機能

このダイアログボックスをクリップボードにコピーして e-mail して下さい

一般的なトラブルの解決策

このプログラムには数多くのダイアログボックスやアラートボックスが組み込まれており、通常トラブルが起こった箇所で警告が出ます。

以下に、主に生じ得るトラブルとその原因及び対処法を説明します。

始動時のエラー

始動時のエラーは大抵の場合はハードウェアに問題があります。パワークロムのオーナーズガイドに詳しく説明してありますが、ここでも簡単に説明します。

<コンピュータがパワークロムを認知しない>

- ・パワークロム本体の電源が切れているか、電源ケーブルの接続不良、フューズが切れていることが主な原因と考えられます。スイッチ、電源との接続、フューズをチェックして下さい。
- ・パワークロム本体の電源は入るが、コンピュータのソフトウェアが PowerChrom ユニットを認知しない場合は、コンピュータとの USB ケーブルをチェックして下さい。接続、及び可能なら別の USB ケーブルを使って試して下さい。
- ・Mac OS X をクラシックモードで起動している場合には、再度クラシックモードを立ち上げ直して見て下さい。

<パワークロムの内部に問題があるか、プログラムが停止する、始動時に警告が出る>

- ・コンピュータとパワークロムの電源を切り、10 秒位おいてからパワークロムの電源を入れ、次にコンピュータの電源を入れて再度プログラムを始動して見て下さい。
- ・オリジナルの CD ディスクから再度インストールして見て下さい。

<プログラムが奇妙な設定で開始する>

ユーザが設定したセッティングを含んだデータファイルをオープンしてプログラムを始動したか、スタートアップ設定がカスタマイズされている場合が考えられます（このような場合は使用できないメニューや、表示しないメニューがあるかも知れません）。



・パワークロムのプログラム自体から再度始動します。それでも問題がある場合は、システムフォルダーのプレファランスフォルダーから PowerChrom StartUp ファイルを削除する必要があるかも知れません。詳細は [始動セッティング](#)、[141 ページ](#)を参考にしてください。次にパワークロムを始動する際は、初期設定の新ファイルが作成されます。

<以前に作成したシーケンスやメソッドが動かない>

・古いメソッド (PowerChrom 2.3.x 以前に作成された) には古いハードウェアに特有なセッティングが含まれているかもしれません。この様な場合に、古いメソッド (シーケンスを含めて) を使って新しいハードウェア PowerChrom 280 ユニットで動かすと問題が発生する恐れがあります。初期の PowerChrom ではポンプコントロール ([54 ページ](#)) の設定範囲は 1V ではなく 10V でした。PowerChrom 280 は 2, 5, 10 V です。該当するメソッドを開きポンプコントロールの設定範囲を変更して下さい (設定が正しそうな場合も、新たに設定し直して下さい)。これでそのメソッドは使用できる筈です。

インターフェース上の問題

<ショートカットキーが正常に機能しない>

・コマンドメニューが削除されてるか、そのショートカットキーには別のコマンドメニューが登録されています。メニュー ([表 A-1](#)、[152 ページ](#)) を表示してと比較して下さい。後で説明するリセット操作に従って下さい。

<メニューやコントロール, セッティングが説明書通り機能しない>

・パワークロムの画面設定を修正したセッティングファイルでプログラムを立ち上げたか、カスタマイズしたプログラムを始動設定としてプログラムを始動 ([141 ページ](#)) した為です。この様な場合は初期設定されている始動セッティングを解消し、PowerChrom StartUp ファイルを削除します ([始動セッティング](#)、[141 ページ](#))。次にパワークロムの始動する時には、新規 StartUp ファイルが作成されます。

・必要な時以外は表示しないメニューやコマンドがあります。開いているドキュメントが正しい形式か確かめ、表示画面が正しいかを確認してからメニューをチェックして見て下さい。

<メニューを変更しロックしてしまった>

- ・ <Ctrl-≡> (Windows PC) か ⌘-≡ (Macintosh) を入力してダイアログボックスを呼び出し、メニューの設定や始動の設定、セーブオプションに緊急アクセスし修正する [142 ページ](#)。

<該当する場所にダイアログボックスが出ない>

- ・ 複数台のモニターを使用している場合は、ダイアログボックス通常メインモニター（メニューバーが表示している）に映ります。
- ・ プログラムはポインターポジションのモニターにダイアログボックスを呼び出します。ポインターをその場所に移動して、コマンドキー操作でダイアログボックスを呼び出します。タイトル付きのダイアログボックスはタイトルバーをドラッグして移動できますので、所定の場所に戻すのは簡単です。

<記録中にコンピュータがハングしデータが消失する>

- ・ PowerChrom のハードウェアユニットとコンピュータとのケーブルの接続が完全でないか、ケーブル自体が不適格な場合。また、古いシステムではネットワークの接続の問題や、不的確なシステムの拡張もこの種の問題が生ずる原因となります。
- ・ ネットワークの接続の問題かも知れません。
- ・ 記録時はできるだけ別のソフトウェアを使用しないでください。コンフリクトする恐れがあります。スクリーンセーバ、電子メール、ネットワークソフトウェアはオフにしてください。

記録時のトラブル

<メモリーの限界を超えて使う (Macintosh)>

PowerChrom では最初はデータを RAM に記録しますので、十分な RAM メモリー容量が必要です。割り当てメモリーを増加すれば、RAM に記録できるデータ量は増えます ([図 B-1, 155 ページ](#))。

- ・ Macintosh での使用メモリーを増加するにはプログラムを終了し、ファインダーのプログラムアイコンを選び、File メニューの Get Info (又は、<⌘-I>を入力) を指定します。Preferred size ボックスの設定値を大きくします。

<ランで予定したサンプル数が記録されない>

・レコーディングユニットを操作する際にコンピュータがビジーで記録が停止してしまい、サンプリングの割り当て時間が過ぎてしまった恐れがあります。長時間メニューを押し続けずに注意し、記録中はCDなどにコピーや書き込みなどを避ける。

・長時間記録していると、予期したサンプル数と違うかも知れません。例えば、90分間10サンプル/秒で記録すると54,000サンプル分記録される筈ですが、53,900しか無い場合があるかも知れません。これはコンピュータの内部クロック（プログラムを介してユニットにサンプリングの開始と停止時間を指示する）と、レコーディングユニット（サンプリングする）との間のタイミングのズレから起こります。コンピュータのタイミングは約0.1%ドリフト率を持っており、従って1万分の1のオーダーでミスマッチングが生じ得ます。このタイミングのズレは僅かなのでクロマトグラムのリテンションタイムの決定には影響ありません。

印刷上のトラブル

<いつも何ページも印刷する>

・データドキュメントから印刷している場合には、Report Layoutダイアログボックス [109ページ](#)のセッティングに基づいて印刷します。各ランのレポート印刷に依ってはメソッドの詳細などが数ページにわたったり、そのドキュメントのサンプルテーブルも印刷されてしまいます。<Print Window...> コマンド [106ページ](#)を使えばアクティブ画面だけを印刷できます。

クラッシュ

<プログラムが突然終了したり、破損、フリーズする>

・プログラムが突然終了したり、破損（爆弾記号のダイアログボックスが出ます）したりポインターがフリーズしたら、コンピュータのシステムトラブルです。これが繰り返し起こったら、互換性の無いソフトウェアが原因である恐れがあります。何か新しいソフトウェアをインストールした後に、パワークロムを立ち上げた時にこの種の問題が発生した場合は、一度その新しいソフトウェアをアンインストールして見て下さい。

- ・ Mac OS X で動かしている場合は、システムの拡張器を外し、同じ症状が出るかを確認して下さい。詳細はマッキントシユのユーザーズガイドを参照して下さい。
- ・ パワークロムの StartUp ファイルがダメージを受けている恐れがある場合。コンピュータのハードディスクから 'PowerChrom StartuUp' ファイルを取り除いて下さい ([始動セテイング](#), 141 ページ)。プログラムを再度立ち上げると、新規ファイルが作成されメーカー出荷時の初期設定でオープンします。
- ・ 使用中のコンピュータのハードディスク上の PowerChrom プログラムソフトウェアがダメージを受けている恐れがあります。オリジナル CD から再度インストールし直します。
- ・ 抗ウイルス用ソフトウェアでシステムディスクをチェックして見て下さい。ウイルスが見つかったら感染したコンピュータ、ディスク、バックアップをチェックして感染を取り除いて下さい。

C

A P P E N D I X C

技術資料

このアペンディックスではパワークロムのプログラムで採用している演算とアルゴリズムについて詳細に説明します。ソフトウェアの使い方には関係しませんので、必要なければ飛ばして下さい。

データの収録

本プログラムはどのような場合でも生のデータ値を読み取って表示します。従って収録されるデータは標準的、理想的なピーク形状に近づく様な人工的なスムーズ処理や変更はしていません。パワークロムシステムにはノイズを減らしたり（特に一次干渉源となる電源ノイズ）、シグナルの精度を上げるために数々の対策を設けています。

データはオーバサンプル（10k/s）され、記録された各データポイントをサンプル数で平均処理されます。オーバサンプリングによりシグナルの理論精度は16ビットから20-24ビットに向上できます。10サンプル/秒以下のサンプリング速度では（通常のクロマトグラムの記録では十分な速度）、サンプリング処理はメインシグナルに対してフェーズを固定してノイズを除きます。電源周波数を積分値に置き換えてサンプルを平均化処理することで電源ノイズを排除します。

ピークの検出

ピーク検出する目的に限って Savitzky-Golay スムージング法（二次：スムージングの幅3、7データポイントで）を使ってデータをスムージング処理します。この処理は記録や読み取り値には影響しません。常時生データを記録し読み取ります。

増加タンジェントサーチ法を用い5連続ポイントがスレッシュホールドを越え右肩上がりの勾配を示すと、それをピークの立ち上がりとし

ます。ピークの終了はピークに続くリーディングエッジ、または勾配を持つ 10 ポイントがスレッシュホールド以下になった場合とします。これでピークは特化されます。

ピークの検出は解析用にメソッドで設定したインテグレーションパラメータにより管理されます。これにより解析の詳細とフレキシブルな管理がユーザ側できますので、不可解なデータも簡単な手作業でピークの修正が行えます。インテグレーションパラメータはいつも絶対的に有効とはいえません：幾つかのパラメータ（最小ハイト、最小面積、最小幅、最大幅）はピークレポートに記載される内容と完全には一致してない場合もあるかも知れません。特にスキム処理されたピークなどはある限界があるのも事実です。解析の過程でピークに制限を設けたのはこの理由からです。特にスキム処理する前には色々な方策が考えられます。ピークの確定（例えば、谷渡りポイントとドロップポイントのどちらでピークを分けるかの決定やピークをスキムするかどうかの決定）は一度しか行わず、ピークが否認される度には行ないません。パラメータは定性的に作用しますので、例えば、最小ピーク面積を増やせばその分否認されるピークが増えますが、その判定には若干の変動があるかも知れません。実際にはその狭間にあるピークにしか影響しませんし、いつでも手作業で修正できます。

ピークの同定

キャリブレーションテーブルに記載された既知のリテンションタイムとクロマトグラムの化合物のリテンションタイムが一致することで同定されます。キャリブレーションランでは同定に供されるピークはキャリブレーションテーブルの 'In Level' (66 ページ) に記載されているピークだけです。データランでは総てのピーク（設定した濃度レベル以外の内部標準を除き）が同定に供します。

キャリブレーションテーブル内 (63 ページ) の総てのリファレンスピークはクロマトグラムに対してリテンションタイム順に審査されます。クロマトグラムで一致したピークがキャリブレーションテーブルのリファレンスピークと同一視できます。リテンションタイムのトレランスで規定した時間の幅内の最大ピークはリファレンスピーク（この最大ピークとはキャリブレーションの形式で指定したピーク面積、又はピークハイト）と一致します。ここでのリファレンスピークとは同じ様な性質を示すピークであることが前提です。

リファレンスピークのリテンションタイム (62 ページ) は一致するクロマトグラムピークのリテンションタイムに等しくなるように調整されます。同じリファレンスピークでそれ以外のピークは同じファク

ター新たなリテンションタイムを掛け古いリテンションタイムで割る)でリニアに調整されます。そのランがキャリブレーションランならリテンションタイムは更新されキャリブレーションテーブルも改新します(132 ページ)。それ以外では調整されたリテンションタイムを使って同じデータランのピークをマッチングします。シーケンスランは前のキャリブレーションランで作成されたキャリブレーションテーブルを使って実行されます。

次に、リファレンスピークとして規定してい無いピークを総てチェックします。これらのピークは同種類の性質を示すものとは見なされませんのでマッチングは個々に行われます。クロマトグラムピークとキャリブレーションピークとが同じであると判定するには、リテンションタイムが一致することです。リテンションタイムにトレランスの幅を設けキャリブレーションピークに最も近いクロマトグラムピークがそれに入っておれば一致とします。一致するクロマトグラムピークが複数存在すれば(トレランスの幅がオーバーラップして)最もキャリブレーションピークに近いピークを正しい一致ピークとします。

ピーク面積の測定

ピーク面積はマニュアルで面積を決めるのに使う技法をエミュレータで書き換えるインテグレーションアルゴリズム：ドロップライン；タンジェント；直線ベースライン；により決定します。この方法による面積の決定は再現性があり、チェックが簡単で普遍性もあります。パワークロムはピークのカーブフィッティングや、特定の環境でしか有効ではないピークの形状に関する詳細な知識とかピークが生じる化合物数についての十分な知識が必要な複雑な技法はサポートしません。良い結果を得る要因は分離の良いピークが得られる分離カラムを選択するとか溶媒系の選択に係っており、インテグレーションアルゴリズムの選択には限界があります。

ピーク面積は生データポイントを積分することにより決定します。プログラムはピークの始まりからピークの終わりまでのデータポイントをつなぐ線とベースラインで囲まれたエリア(正確には多角形として)の面積を算出しそれをピーク面積とします。設定したディスプレイオプションに従って、ピークエリアは通常カラーで塗りつぶし表示します。多角形のピークエリアと曲線下の真のピークエリアとの誤差はクロマトグラムから生じる別の誤差と比較しても十分無視できるものです。

ピークは少なくとも 20-100 データポイントの幅があれば極めて正確に積分されます。データポイントが多ければ精度は若干上がりますが、コンピュータの速度が遅い機種では演算に時間がかかります。データポイント数 20 以下のピークでは面積の決定に重大な誤差を生じます。この恐れが有る時はサンプリング速度で調整して下さい。

定量計算

クロマトグラムのピーク面積とハイトは濃度に比例しますので、分析する化合物が定量できます。この量を濃度として、または容量、マイクロモルなどの単位で表すことができます。化合物の量を決定する為に、パワークロムでピーク面積、ピークハイト、内部標準に対するピークハイト百分率とピーク面積百分率、総ピーク面積百分率、総ピークハイト百分率を求めます。

パワークロムはディテクターレスポンスの変動に対してフレキシブルな対応で定量します。最も単純な例では、ディテクターレスポンスは原点を通る直線を示し、求める量は (A) はディテクターレスポンス (D) にレスポンス係数 (RF) を掛けたものに等しく、キャリブレーションランから算出できます。

$$A = D \times RF$$

分析する物でレスポンス係数は異なります。

インジェクション容量と試料調整による変動（しばしば重大な誤差になる）を補正する為に、未知試料の中に既知化合物を一定量（内部標準 IS）を加えてインジェクションします。分析する各化合物に対するディテクターレスポンスはこの内部標準のレスポンスとの比で調整し、調整した後の量を求めます。

$$A_i = D_i \times RF$$

'ディテクターレスポンス係数' や 'レスポンス係数' は通常はリニアと仮定して処理されますが、レスポンスは実際はリニアを示すとは限らず、特に分析する濃度幅が広い場合は変動します。プロットが原点からのオフセット（切片）を持つ直線を示す場合もあります。また、ある濃度レベルまでは直線性を示すがそれ以降は曲線傾向を示す例もあります。顕著な直線性を示すものは単純ですが、多点キャリブレーションがいつも可能であるとは限りません。量の校正はディテクターレスポンスのグラフを使って求め、 $D_i \times RF$ でレスポンス係数と量 (D_i) から定量化します。レスポンス係数の値はキャリブレーション

ションで表示します（直線、原点を通る直線、二次関数を使えば大抵のディテクターレスポンスにフィットします。それ以外は <point-to-point> オプションを使って下さい）。

パワークロムが用いる演算は校正法で変わります。下の説明を参考に、適した形式を選んで下さい。

外部標準法 External Standard (Area, Height)

外部標準を使ってピーク面積かピーク高さを校正するには分析する化合物毎のディテクターレスポンスを正確に決定し、キャリブレーションテーブルに載せる必要があります。プログラムがレスポンスを計測し、検量線からその量を読み取ります。

$$A_i = \text{Amount (量)} (R_i)$$

この校正法ではディテクターレスポンスを非直線的に調整しますが、インジェクション量や試料調整による変動の補正はしません。

内部標準法 Internal Standard (Area Ratio, Height Ratio)

面積百分率や高さ百分率による校正では一定量の内部標準を全ランに使い、キャリブレーションテーブルで分析する化合物毎のディテクターレスポンスに対する比率を正確に決定します。プログラムがレスポンスを計測し、検量線からその量を読み取ります。

$$A_i = \text{Amount (量)} (R_i / R_{IS})$$

この校正法ではディテクターレスポンスを原点を通る直線と見なします（別の検量線タイプも有効かも知れませんが、厳密ではありません）。インジェクション量や試料調整による変動を補正します。

内部標準法 Internal Standard (Area, Height)

内部標準を使ってピーク面積やピーク高さで校正する場合は（百分率法ではなくて）、キャリブレーションテーブルで分析する全ランの化合物（内部標準を含め）と内部標準の既知量のディテクターレスポンスを正確に決定します。プログラムがレスポンスを計測し、検量線からその量を読み取ります。内部標準のレスポンスが算出され、検量線を使ってインジェクション量や試料調整による変動が補正されます。未知の量もそれに準じて補正されます。

$$A_i = \text{Amount}(R_i) \cdot (A_{IS} / \text{Amount}(R_{IS}))$$

この校正法ではディテクターレスポンスを非直線的に調整し、データのインジェクション量や試料調整による変動を補正します。

カラム効率

カラム効率 (Efficiency) はカラムの溶解力を計るものです。類似ピークのカラム効率の経時変化はカラムの劣化を計ることになります。カラム効率は分離化合物に対する理論段数 N として算出されます。大きい数値ほど効率は良く、カラムは化合物に対する理論段数により評価します。

カラム効率はピーク幅とリテンションタイム (保持時間) に基づいています。ピーク幅 (百分率) は設定した % ピークハイで交わるベースラインと平行な線を描画して算出されます。このピークを挟む二点間の時間差がピーク幅に相当します (垂線でピークを分離しピーク幅が算出できない場合もあります)。

$$\text{Efficiency (カラム効率)}, N = (t_R / s)^2$$

ここで

t_R = ピークのリテンションタイム

$\sigma = (\text{width}) / (2\sqrt{-2\ln(h_w)})$ 及び

h_w = ピーク幅を求めた高さ

... 計算は σ の標準偏差を使ってガウスピークと見なして行います。この数式はピーク幅をどの高さから求めても有効です。

標準的な測定法で比較してみますと、10% でのカラム効率は上の式を使えば $N = 18.4(t_R / \text{width})^2$ と計算できます。

三角関数を使ってピークの形状から近似値を求め比較すると $N = 16(t_R / \text{width})^2$ が得られます。

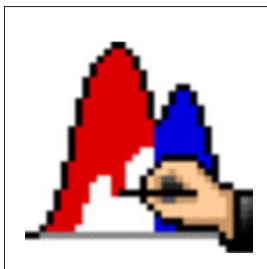
非対称ピークに配慮して近似値を求めるカラム効率に関する実験書もく発刊('Equations for Calculation of Chromatographic Figures of Merit for Ideal and Skewed Peaks', Joe P. Foley and John G. Dorsey, Analytical Chemistry, 55, 730-737, 1983) されております。ただし、ピークハイト 10% でのピーク幅から演算されます ::

$$N = \frac{41.7(t_R/W_{0.1})^2}{B/A + 1.25}$$

B/A は 0.1 (10%) の幅でのピーク非対称性。非対称ピークを B/A で一定とすれば $N = 18.5(t_R / \text{width})^2$ となります。

分解能

分解能は隣接するピークの分離度を計るものです。基準とするピークの平均ピーク幅でリテンションタイムの差を割算して求めます。この校正では 4σ (上のシグマで、ガウスピークの標準偏差) を使ってベースピーク幅を換算します。理論的には 1 点以上の分離が良好なピーク、実際には 2 点以上の非対称でテーリングを示す複雑さを有するが分離が良好なピークが基準ピークとされます。



用語解説

この用語解説は本書に使用されている用語を解説しています。

analyte : 同定や定量分析される物質で、通常は特定の化合物やイオンを指す。

baseline ベースライン : ピークが存在する場合に記録されるバックグラウンドシグナル（理想的にはドリフトフリーの水平線）。また、この直線とピーク下方とで描画されるピークエリアの決定にも使われます。

baseline ベースラインドリフト : ベースラインの位置の変動で、溶出成分、温度、電解液濃度の変化が影響します。

calibration キャリブレーション : 検出器シグナルを分析濃度や定量に相関させる処理。

chromatogram クロマトグラム : 時間に対する検出器シグナルのグラフ。

detector 検出器 : クロマトグラフィーシグナルを得るのに使用する装置。UV-VIS 吸光度計、示差屈折計、電気化学検出器、蛍光検出器、伝導度計、比色計など。

dropline ドロップライン : グループピーク（不随ピーク）を分割する垂直線。

efficiency カラム効率 : サンプルの化合物を分離し溶出させるためのカラムの性能を示す値。

eluant 溶離剤 : クロマトグラフィーのカラムで分析物を液層移動させるのに用いる移動相溶液。

eluate 溶出液 : クロマトグラフィーのカラムを介して溶離する溶液。

elution 溶出 : クロマトグラフィーのカラムへ溶媒を流し溶離させること。

external standard 外部標準 : 濃度が確定した標準品の溶液。数種類の既知の標準液を使って検量線を求めれば正確な定量計算に有効な場合があります。

GC : ガスクロマトグラフィ

gradient 濃度勾配 : ラン中に溶媒の組成を変動させる。例えば、二液濃度勾配では溶媒をA、BとするとB%濃度B%を増し（濃度A%を下げ）て溶出ピークを加速させる。

grouped peaks グループピーク : 境界やベースラインを共有するピークで、隣接するピークの始点終点が共に不変化する。不随ピークとも呼ばれる。

HPLC : 高速クロマトグラフィー (高圧 LC)

internal standard 内部標準 : 濃度を定めた標準品を各検液に加え、インジェクション量の変動を補正する。内部標準のピークが他のピークと離れている場合はキャリブレーションは極めて正確なものとなります。

isocratic : 溶媒組成が一定で、濃度勾配は使わない。

LC : 液体クロマトグラフィー

メソッド : ランの実行法の記述。メソッドドキュメントでランのハードウェアコントロールとピーク検出とその算出パラメータを設定します。

負ピーク : クロマトグラムでピークがゼロより下方に延びたピーク。結果としてピークエリアは-になります。

ピーク : 反応物が検出器を通過するのに対応して検出器からのシグナルが立ち上がって下がる応答。

分解能 : クロマトグラムで二成分の隣接ピークの分離度を時間に対するピークの対称性や広がり度で計ったもの。

retention time 保持時間 : サンプルのインジェクションタイムからピークの最大の高さを示すまでの時間。

ラン : 個々のクロマトグラム

サンプル : クロマトグラフィーのカラムに注入する物質 (通常は分離分析する混合物溶液) 。

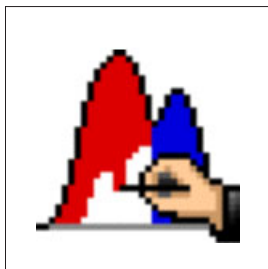
サンプルテーブル : データドキュメントでランを処理するのに用いるシーケンスや、メソッド・キャリブレーションの一連の記録。

シーケンス : 複数のランに用いるメソッド (及びキャリブレーション) の一覧。シーケンスドキュメントでキャリブレーションやメソッド、印刷を管理し複数のランを自動化します。

スキム処理ピーク : 大きいピークの肩 (またはリーディングエッジ) から接線方向に小さいピークを削り採られたピーク。肩ピークとも言われ、特に極小値が無ければ親ピークから分離させます。

symmetry 対称性 : ピークの形状で、理想的なピークは円錐状で左右対称です。

波形 : 波形の形状 (時間に対してプロットする場合は検出器シグナルの形状) 。



インデックス

#、シャープマーク、コラム幅 42, 125

A

About dialog box 22, 155
About PowerChro... コマンド 155
About This Computer ダイアログボックス 157
Accept all new samples 60
Analyse All Runs コマンド 113
Analyse Run コマンド 112, 113
Analysis PowerChrom 146
Apple メニュー
 About PowerChrom... コマンド 155
Axis Labels & Scales ダイアログボックス 29
Axis Labels & Scale... コマンド 29
アイコン 8
アクティブチャンネル 20
アクティブラン 21, 32

B

bipolar 表示 27
バックグラウンド記録 22
ベースライン
 カラー 31
 構築 77, 118, 128
 ドリフト 77
 オフセット 54
 タイプ 77, 118, 128
分解能 127, 169

C

Calibration Units ダイアログボックス 61
Calibration Unit... コマンド 61
Calibration Used 131
 変更 131
Calibrations サブメニュー 132
Chromatogram コマンド 16, 112
Chromatogram Layout 109
Clear コマンド 40
Clipboar コマンド 101
Clipboard ウィンドウ 101
Collapse Rows コマンド 43
Color & Pattern ポップアップ 31, 63, 125
Column ポップアップメニュー 37
Copy Run コマンド 97
Copy Specia... コマンド 99
Cut コマンド 40
チャンネルセパレーター 18, 26

D

Data メニュー 150
 Analyse All Runs コマンド 113
 Analyse Run コマンド 112, 113
 Discard Peak... コマンド 120
 Load External Run... コマンド 121
 Manage Calibrations... コマンド 131
 Manage Method... コマンド 131
 New Calibration コマンド 128, 131
 New Method コマンド 131

- Set Injection Time コマンド 122
- Units Conversio... コマンド 44
- Delete Peaks コマンド 120
- Delete Rows コマンド 40
- Device Contro 174
- Default Method 16
- Discard Peaksx ダイアログボックス 121
- Discard Peak... コマンド 120
- Display メニュー 150
 - Axis Labels & Scale... コマンド 29
 - Display Peaks コマンド 31
 - Fill Peak コマンド 31
 - Lines & Colors... コマンド 30
 - Peak Display... コマンド 30
 - Peak Report Settings... コマンド 79, 123
 - Print Layou... コマンド 78, 107
- Display Peaks コマンド 31
- dpi 99
- ダイアログボックスの配置 160
- 代理店情報 155
- データディスプレイエリア 18, 26
- データドキュメント 8, 112~135
 - サイズの最適化 97
- データの再解析 130, 132
- データバファリング 139
- データファイルを追加する 103
- データ分解能 27, 115
- データの取り込み 143
- データの転送 98~101
- データロス 23, 160
- データを圧縮 23
- データをコピーする
 - 画像として 99
 - テキストとして 99
- ディスプレイセッティング 26~43, 78, 88, 138
 - 予想 115
- デジタル出力 75
- ドキュメント形式
 - Calibratio 8, 58~70
 - Data 8, 112~135
 - Method 8, 71~79
 - Sequence 9, 80~89, 101
- ドキュメント 8

- 検証 92
- verifying 92
- ドキュメント形式
 - Calibration 8, 58~70
- ドキュメントとウィンドウ 9
- ドキュメントを検証 92
- ドキュメントを連結 81
 - 場所 84
- ドリフト 77
- ドロップポイント 118

E

- Easy Access コマンド 11
- Easy Access ウィンドウ 11~13, 138
- Edit メニュー 148
 - Clear コマンド 40
 - Collapse Rows コマンド 43
 - Copy Run コマンド 97
 - Copy Special... コマンド 99
 - Cut コマンド 40
 - Delete Peaks コマンド 120
 - Delete Rows コマンド 40
 - Expand Rows コマンド 43
 - Export Peaks コマンド 100
 - Insert Row コマンド 40
 - Select All コマンド 40
 - Show Clipboar コマンド 101
 - Undo コマンド 98
- elapsed time 94
- Exit コマンド 14
- Expand Rows コマンド 43
- Expert Integration コマンド 72
- Expert Repor 124
- Export Peaks コマンド 100
- エリアを算出 165
- エントリー番号 62, 74
- 演算処理を停止 76
- 演算パラメータの変更 129

F

- File メニュー 148
 - Newl... コマンド 14
 - Open Appendl... コマンド 103

Openl... コマンド 13
 Page Setup... コマンド 104
 Print Window... コマンド 106
 Print... コマンド 06
 Revert to Save コマンド 98
 Run Append..... コマンド 96
 Run... コマンド 93
 Save As... コマンド 98, 101~102
 Save Calibration As... コマンド 102
 Save コマンド 101
 Save Method As... コマンド 102
 Verify コマンド 92
 Fill Pattern 125
 Fill Peaks コマンド 31
 Format Columns ダイアログボックス 37
 Format Columnss... コマンド 38
 ファイル形式
 セッティング 102
 テキスト 143~146
 ファイルの変換 143~145
 ファイルを設定 141
 ファイルを閉じる 14
 フィルター処理 56
 フリーコントロールポイント 118
 不的確なデータを除 60

G
 Go To Run ダイアログボックス 21, 32
 Go To Runs... コマンド 20, 32, 35
 Graticule ボタン 30
 Group コマンド 117
 外部装置の制御 54, 74~75
 外部装置 54, 74~75
 外部ラン 33, 121
 技術サポート 155~156
 グループピーク 116, 117

H
 Hardware Settings ダイアログボックス 53
 Hardware Settings... コマンド 52, 72
 Hardware Start-Up ダイアログボックス 142
 Hide All Runs 34
 Hide Column コマンド 37

 Hide From Overlay コマンド 35
 ハードウェアセッティング 3
 はじめに 8~10
 非従属ピーク 116, 117
 非スキム処理 119
 表記行の編集 39~43, 67
 表記行間のデータの扱い 40
 表記行から情報をコピーする 42
 表記設定 35~43
 平均処理 87
 保持時間 62, 125
 本書の使い方 2

I
 Inject Settings ダイアログボックス 50
 Inject Settingss... コマンド 50, 72
 Input Amplifie... ボタン 54
 Insert Row コマンド 40
 Integrator Contro 欄 75
 インデックス番号 85
 インジェクション設定 50
 インジェクション信号 50~52, 74
 インテグレーション 76~78
 いったん停止 16, 54, 94, 129
 印刷 104~110
 カラー 104
 高分解能 105, 115
 オプション 106
 問題点 161

J
 時間軸 18, 28
 時間軸スケール 28
 時間のズレ 161
 時間表示 139
 自動スケール 19
 軸ラベル 29

K

- カスタマイズ 10
- カラムの経時変化 63
- カラー
 - クロマトグラムシグナル 30
 - 印刷 104
- カラム効率 127
- 解析 10, 130
 - 更新 132
- 解析情報 112
- 解析モードで始動 146
- 解析モード 11, 146
- 解析の更新 132~135
- 加重平均 60
- 加重平均処理 60
- 重ね合わせ
 - チャンネル 33
 - ラン 21, 33~35
- キーショートカット 140, 152
 - 変更 140
- キャリブレーションコントロール 186
- キャリブレーションドキュメント 8, 58~70
 - 組み込み 58
 - 外部へ作成 58
- キャリブレーションレベル 65 ~ 66, 87
- キャリブレーションメニュー 59, 151
 - Calibration Unitd... コマンド 61
 - Manage Level... コマンド 65
 - Peak Area コマンド 59
 - Peak Area Ratio コマンド 59
 - Peak Height コマンド 59
 - Peak Height Ratio コマンド 59
 - Sample Averaging... コマンド 60
- キャリブレーションモード 59, 135
- キャリブレーションポップアップ 87, 131
- キャリブレーションテーブルウィンドウ 59, 68
- キャリブレーションバージョン 133 ~ 134
- キャリブレーションウィンドウ
 - Response Curve ビュー 67
 - Table ビュー 62
- キャリブレーションのバージョン 133~134
- キャリブレーションの調整 133
- キャリブレーションを変更する 131
- キャリブレーションを管理 81~85, 131~132
- キャリブレーションを編集 133
- キャリブレーションを移出 134
- キャリブレーションを取り出す 102, 134
- 記録 10, 21~23
 - 表示中 21
 - 長さ 22
 - メモリー 23
 - Not Recording メッセージ 52
 - 問題 160
- 記録時間 22
- 記録のスケール表示 27, 44
- 緊急アクセス 142
- クロマトグラムの表示設定 26~33
- クロマトグラムツール 18
- クロマトグラムウィンドウ 17~20, 112
- クラッシュ 161
- 検索 20
- 検出器オフセットコントロール 54
- 検出器出力電圧 53
- 検出器入力とレンジ 53, 144
- 検出器の反応 70
- 検量線の関数 64, 69~70, 166
- コマンドメニュー
 - 隠す 140
 - ロックする 140
- コメント 58, 80, 129, 130
- コラム表題の拡張 37
- コラム
 - フォーマット 37, 38
 - 隠す 38
 - 再配列 38
 - 表示 38
 - 表題 36
 - 幅 36
- コラムの再配列 38
- コラム幅を変更 36
- コンピュータ 2
- コントロールポイント 118
- コントロールポイントの扱い 118
- コントロールとディスプレイ 9
- 効率 127, 168

高分解能印刷 105, 115

L

Level Information 段落 65, 68
Level ポップアップメニュー 87
Lines & Colors ダイアログボックス 30
Lines & Color... コマンド 30
Link Calibration ディレクターダイアログ 84
Link Method ディレクターダイアログ 84
Load Calibration ディレクターダイアログ 83
Load External Run ディレクターダイアログ 121
Load External Runs... コマンド 121
Load Method ディレクターダイアログ 83

M

Manage Calibrations ダイアログボックス 82
Manage Calibrations... コマンド 82, 131
Manage Levels ダイアログボックス 65
Manage Levelss... コマンド 65
Manage Methods ダイアログボックス 82
Manage Methodss... コマンド 82, 131
Manual Sampling ダイアログボックス 15
Menus ダイアログボックス 140
Menuss... コマンド 140
Method コマンド 71
Method ドキュメント
外部に作成 71
Method ドキュメント 8, 71~79
Method メニュー 151
Expert Integration コマンド 72
Hardware Setting... コマンド 52, 72
Inject Settings... コマンド 50, 72
Method Units... コマンド 73
Simple Integration コマンド 72
Units Conversion... コマンド 73
Method ポップアップメニュー 86, 131
Method Table ウィンドウ 72, 74
Method Units ダイアログボックス 73
Method Units... コマンド 73
Method Used 131
変更 131

Methods サブメニュー 132
マニュアルサンプリング 15~16, 50
マニュアルサンプリングを設定 50
メソッドタイトル 129
メソッドの調整 132, 133
メソッドを変更 131
メソッドを編集 132, 133
メソッドを取り出す 102
メソッドを管理 81~85, 131~132
メニュー
変更 140~141
隠す 140
ロックする 140
メモリー 22
メモリーの問題 160
問題解決 92

N

New Calibration コマンド 81, 128, 131
New Document ダイアログボックス 13, 58
New Method コマンド 81, 131
New Table ダイアログボックス 12
News... コマンド 14
Normalisederia 126
Normalised height 126
内部標準 59, 63, 66
内部標準のグループ化 63
入力アンプ 53, 54~57
入力信号のコントロール 56

O

Open Append directory ダイアログボックス 104
Open Appends... コマンド 103
Open Chart Document ダイアログボックス 144, 145
Open Data ディレクターダイアログ 12
Open directory ダイアログボックス 13
Open Table ディレクターダイアログ 12
Opens... コマンド 11, 13
Opening 143

- Options ダイアログボックス 138
- Options... コマンド 138
- Output Range ポップアップメニュー 54
- Overlay Channels コマンド 33
- Overlay メニュー 150
 - Overlay Channels コマンド 33
 - Overlay Runs 3-D コマンド 34
 - Overlay Runs コマンド 34
- Overlay Off 33, 34
- Overlay Runs 3-D コマンド 34
- Overlay Runs コマンド 34
- オフセット表示 57

- P**
- PowerChrom の複製に命名 4
- PowerChrom をカスタマイズ 137~ 146
- PowerChrom Dealer Address ダイアログボックス 156
- PowerChrom をインストール 3
- Page Setup オプション 105
- Page Setup... コマンド 104
- Peak Area コマンド 59
- Peak Area Ratio コマンド 59
- Peak Display ダイアログボックス 30, 63
- Peak Display... コマンド 30, 113, 125
- Peak Height コマンド 59
- Peak Height Ratio コマンド 59
- Peak Information 段落 62
- Peak Name 125
- Peak ポップアップメニュー 67
- Peak Report コマンド 123
- Peak Report Layout 124
- Peak Report Layout ダイアログボックス 78
- Peak Report Layou... コマンド 78
 - Display menu 78
- Peak Report Settings ダイアログボックス 124
- Peak Report Settings... コマンド 79, 123
- Peak Report ウィンドウ 100, 123
- Peaks メニュー 115, 117, 150
 - Group コマンド 117
 - Skim from Left コマンド 119
 - Skim from Right コマンド 119
 - Ungroup コマンド 117
 - Unskim コマンド 119
- Preferences サブメニュー 149
 - Menus... コマンド 140
 - Options... コマンド 138
 - Save Settings... コマンド 102, 141
 - Start-Up Settings... コマンド 141
- Print Layout ダイアログボックス 107
- Print Layout... コマンド 78, 104, 107
- Print Window... コマンド 104, 106
- Print... コマンド 104, 106
- パーセントスケール表示 27, 44
- ピークエリア 76, 126
 - 標準化 126
- ピーク検出 76~78, 163
- ピークハイト 76, 126
 - 標準化 126
- ピーク分解能 127, 169
- ピーク幅 76, 126
- ピーク番号 125
- ピークツール 19, 115
- ピークの痕跡 119
- ピークの同定 164
- ピークのマッチング 165
- ピークを修正 115~120
- ピークを追加 117
- ピークを分割 116
- ピークを解消 120
- ピークラベル 30
- プレファレンス 138~141
- プログラム名の前設定 146
- プログラムを停止する 5
- プログラムを始動する 11
- ページフッター 105
- ページ設定 104 & 105
- ポインター 20, 39
 - ドラッグ 27
 - 十字 41
 - セパレータ 26
 - ストレッチ 27
- ポップアップリスト 113

ポンプコントロール 54

Q

Quit コマンド 14

R

Reject outlying samples 60
Repeat Rows ダイアログボックス 42
Response Curve ビュー 67
Revert Scale コマンド 29
Revert to Saved コマンド 98
Run Append ディレクトリーダイアログ 96
Run Append... コマンド 96
Run button ポップアップメニュー 35
Run ボタン 20, 21, 32~35
Run Info コマンド 128
Run Info ウィンドウ 129
Run ミニウィンドウ 20, 21, 32, 112
Run Table ディレクトリーダイアログ 93
Run... コマンド 11, 93
ランアクション 86
ランの移動 32
ランの形式 86
ランの状態 21
ランの長さ 94
ランの取り込み 103, 121
ランタイム 94
ランニングテーブル 93~95
ランメッセージを追加 103
ラン番号 85
ランを追加する 96, 103
リーディングピーク 119
リファレンスグループ 63
量 (amount) 166~ 168
レンジ 54, 55
レポート 106~110
連結ドキュメントのロケーション 84

S

Sample Averaging ダイアログボックス 60
Sample Averaging... コマンド 60
Sample Control 段落 5
Sample Table コマンド 130
Sample Table ウィンドウ 81, 85, 130
Sampling Speed ポップアップメニュー 52
Save As... コマンド 98, 101~102
Save Calibration A... コマンド 102
Save コマンド 101
Save Document As ディレクトリーダイアログ 102
Save Method A... コマンド 102
Save Settings As ディレクトリーダイアログ 103
Save Settings... コマンド 102, 141
Scale ポップアップメニュー 18
Scroll ツール 19
Scrolling ボタン 21, 32
Select All コマンド 40
Sequence ドキュメント 9, 80~89, 101
Sequence メニュー 151
 Manage Calibrations... コマンド 82
 Manage Methods... コマンド 82
 New Calibration コマンド 81
 New Method コマンド 81
Set Injection Time コマンド 122
Set Injection Time ダイアログボックス 122
Set Scale ダイアログボックス 55
Set Scale... オプション 55
Show All Data コマンド 29
Show All Run 34
Show Clipboard コマンド 101
Show Columns ダイアログボックス 37
Show Columns... コマンド 37
Show Dialog Box ダイアログボックス 142
Show In Overlay コマンド 35
Signal Offset ダイアログボックス 57
Simple Integration コマンド 72
Simple Report 124
Skim from Left コマンド 119

Skim from Right コマンド 119
Standard Scale コマンド 29
Start ボタン 15, 20
Start-up 問題 158~159
Start-Up Setting... コマンド 141
Status Panel 15~16, 51, 94, 95
Store Data directory ダイアログボックス 95
System Interruptions 23
サンプル数 161
サンプルの平均処理 60
サンプリング速度 52
サンプリングの設定 50~57
ショートカットキー 147
シグナルのプレビュー 54
シーケンスを取り出す 101, 135
シグナルを増幅する 53
シグナルのプレビュー 154
システム構成情報 156
シャープマーク # 表セル内 42
初期設定 131, 132
初期メソッド 132
手動ピーク変更メッセージ 120
振幅軸 18, 27~28
スキム処理 77, 119
スキム処理ピークを追加 117
スキムレシオ 77
スクロールバー 18
スケール
移動 27
設定 27
引き延ばし 27
スタートする前に 2
ステータス 21
スレッシュホールド 76
水平軸を圧縮 19, 28
セッティング 102
セッティングファイル 102
その他の機能 10

T

Title 拡張コントロール 137
タイトルバー 17
対称性 127
谷ポイント 118
単位 43~46, 61, 73
単位変換 44~47
単位名 46
単位変換を表示 27, 44
単極表示 27
テキストファイル 143, 143~146
テンポラリーファイル 139
停止中にポンプをグラジエント制御 94
定量計算 166~168
トラブルシューティング 158~162
トレランス 62
特殊文字 38

U

Undo コマンド 98
Ungroup コマンド 117
Unit ポップアップメニュー 46, 61
Units Conversion 27
サンプルデータを使って 46
Units Conversion ダイアログボックス 44, 73
Units Conversion... コマンド 44, 73
Unskim コマンド 119

V

Verify コマンド 92
View ボタン 59, 67

W

Waveform ボタン 30
Waveform カーソル 114
Waveform Curso 表示 19
Windows メニュー 149
Calibration Table コマンド 59, 68
Chromatogram コマンド 16, 112
Clipboard コマンド 101

Easy Access コマンド 11
Method Table コマンド 72, 74
Peak Repor コマンド 123
Run Info コマンド 128
Sample Table コマンド 81, 85, 130

ウィンドウ

Calibration Table 59, 68
Chromatogram 17~20, 112
Clipboard 101
Easy Access 11~13, 138
Method Table 72, 74
Peak Report 123
Run Info 129
Sample Table 81, 85, 130

割り当てメモリー 22

Y

溶液の液量 127

Z

Zoom ポップアップメニュー 19, 29

Zoom Selection コマンド 29

Zoom ツール 18, 113



ライセンス及び保証承諾書

コピーの権利と商標

eDAQ Pty Ltd は、コンピュータソフトウェア及びパワークロムを含むハードウェアの所有権を展開します。全 eDAQ ソフトウェアとハードウェア、それに付随する書類は、コピー権により保護されており、いかなる場合も再生したり変更は認めません。また、その部分に派生する製品の製造も認めません。eDAQ は自社商標に対する唯一の所有権を有し、会社名、ロゴ、製品名の商標登録権を申請しています。

範囲

この承諾書は、eDAQ Pty Ltd 及び eDAQ 製品の購入者との間のもので、一ソフトウェア、ードウェア、又はその両方一、eDAQ の役割、購入者、その製品のユーザに係る全ての義務と責任を包括しています。購入者（又は、いかなるユーザーも）は本製品を使用することによって、この承諾書の条件を受け入れます。この承諾書に対する変更は、eDAQ 及び購入者の同意が必要で、すべて記述で記録します。

ハードウェアの補償

eDAQ はハードウェアの購入者に対して、購入日から 1 ケ年は製品の材料及び完成品の欠陥を無償補償致します。欠陥があったならば、eDAQ は便宜に則り装置の修理又は交換を致します。保証期間は、修理や交換に要する日数分だけ延長いたします。

購入者は購入者は欠陥製品を返送する前に、eDAQ とコンタクトして返送認可を取ります。こ

の保証は、正常にハードウェアを使った場合や作動仕様範囲で使用した場合のみ有効です。

ハードウェアを改造したり、物理的、電氣的に不正常的な使用によるもの、環境の不備によるもの、不的切な接続、標準品でないコネクタやケーブルを使用した場合、オリジナルの ID マークを変更したものは、この限りではありません。

ソフトウェアの補償

購入者には、供給されたソフトウェアを使う為の非独占的な権利があります（例えば、購入者の従業員や生徒には使用する権利が与えられていますし、彼らはこの承諾書を支持することを規定しています）。

購入者は、eDAQ ソフトウェアをバックアップ用に複数コピーすることができます。しかしソフトウェアプログラムの各購入者には、いかなる時も 1 台のコンピュータで使用するためのライセンスだけしか与えられていません。

購入したプログラムを複数コピーしても、同時に複数のコピーを使用することはできません。サイト・ライセンス（複数ユーザ向けライセンス）は、1 組のディスクしか提供されていないくても、5 枚のプログラムコピー用としての使用が認められています。

責務

購入者及びeDAQ製品を使用する人は、相当する目的に沿った分別あるマナーで使用することに同意し、自身の行為及びその行為による結果に対し責任を取る事に同意します。

eDAQ製品に問題が生じたら、eDAQはその対処に全ての責務を果たします。このサービスは、その問題の性質により出費も伴いますが、本承諾書の別項に従います。

制限

eDAQ製品は、外部要因（例えば、使用するコンピュータシステム）に影響されますので、絶対的な機能及び信頼度は保証できかねます。この承諾書に含まれない保証、表現、包括するもの、法令は、eDAQ製品に関しては該当しません。従って購入者は、製品の機能や信頼度及び、それを使用することで取得する結果に関しては、全てのリスクを引き受けます。

ユーザ及びeDAQ製品の誤使用から受けるいかなる種類の損傷に対する請求も、eDAQやその代理店、従業員には致しません。

eDAQ製品は高品質で製造されおり、実質的に付帯する書類に記述する通りの機能を有します。ハードウェアの保証には制限がありますが、技術サポートが全製品に提供されています

技術サポート

顧客登録フォームに所定条項を書き込み発送しておけば、購入者は購入日から1ケ年、eDAQ製品の技術サポートを無料で受ける権利を与えられます（顧客登録フォームは各製品に含まれています。見当たらない場合には、ご請求下さい）。

管轄の範囲

この承諾書は、オーストラリアのニューサウスウェールズの法により決定されたもので、これに関する訴訟手続きは、オーストラリアのニューサウスウェールズの州最高裁判所に提訴し結審されます。

有限会社 エー・ディー・インスツルメンツ・ジャパン

本社 〒461-0001 名古屋市東区泉 2-28-24 ヨコタビル 4F

TEL : 052-932-6462 FAX : 052-932-6755

<http://www.adi-japan.co.jp> e-mail : info@adi-japan.co.jp